

Parametrización de potenciales de interacción entre nanopartículas mediante el uso de *machine learning*

Tutor: Dr. Leandro Luis Missoni, **Co-tutor:** Dr. Mario Tagliazucchi

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

Los supercristales de nanopartículas (SCNPs)¹ son un nuevo tipo de material formado por arreglos ordenados periódicos de nanopartículas (NPs), ver Figura. Las NPs poseen un núcleo inorgánico (por ej. de Au, Ag, CdSe, etc) recubierto de ligandos orgánicos. Los SCNPs han sido propuestos para una amplia variedad de aplicaciones en optoelectrónica y nanoelectrónica. En particular, el uso de nanopartículas de tamaños diferentes permite la síntesis de SCNPs binarios, los cuales poseen estructuras supercristalinas análogas a las estructuras cristalinas observadas en sólidos iónicos e intermetálicos (por ej.: NaCl, MgZn₂, Cu₃Au, etc).² Un problema de gran interés actual es comprender los fundamentos termodinámicos que estabilizan ciertos arreglos y estructuras frente a otros, con el objetivo que guíe el desarrollo de estos materiales.

En este proyecto, proponemos el desarrollo de potenciales de interacción entre NPs mediante herramientas de *machine learning* y/o redes neuronales artificiales, a partir del uso de un modelo termodinámico conocido como Teoría Molecular (MOLT, por sus siglas en inglés), que hemos desarrollado recientemente en nuestro grupo.^{3,4} En primer lugar, se propone realizar un estudio sistemático de la energía libre de pares de NPs con distintos radios y largos de ligandos, mediante el uso de MOLT. En una segunda etapa, se evaluará el uso de diversas herramientas de *machine learning* para la parametrización de potenciales interpartícula que tomen en cuenta todas las variables de interés. Se estudiará el uso de diferentes descriptores para minimizar el error relativo entre los valores de energía libre del conjunto de datos de entrenamiento y la metodología propuesta. Finalmente, se utilizarán los potenciales obtenidos para el cálculo de la energía libre de SCNPs, los cuales se compararán con resultados obtenidos para celdas unidades de diversas superestructuras, evaluando así la capacidad de la metodología propuesta para la construcción de diagramas de fase binarios para SCNPs. El abordaje teórico propuesto resultará en una herramienta para predecir la estructura de SCNPs a una fracción del costo computacional requerido por los métodos empleados en la actualidad.

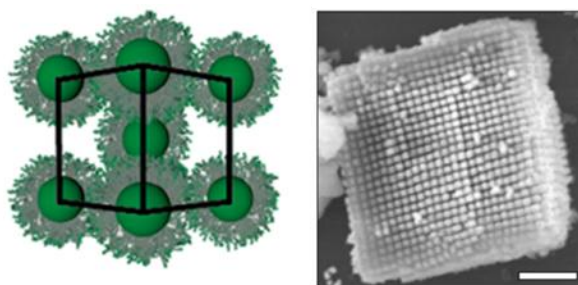
Referencias:

[1] Bassani, Carlos L., et al. "Nanocrystal assemblies: Current advances and open problems." *ACS nano* 18.23 (2024): 14791-14840.

[2] Ye, Xingchen, et al. "Structural diversity in binary superlattices self-assembled from polymer-grafted nanocrystals." *Nature communications* 6.1 (2015): 10052.

[3] Zaldivar, Gervasio, et al. "Molecular theory: A tool for predicting the outcome of self-assembly of polymers, nanoparticles, amphiphiles, and other soft materials." *ACS omega* 7.43 (2022): 38109-38121.

[4] Missoni, Leandro L., et al. "Solvent Isotherms and Structural Transitions in Nanoparticle Superlattice Assembly." *Nano Letters* 24.17 (2024): 5270-5276.



Esquema (izquierda) e imagen de microscopia SEM (derecha) de un supercristal de nanopartículas.