

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

Tutor: Leandro Luis Missoni

Grupo de Interfases y Materiales Blandos

Los nanocanales con formas asimétricas (por ejemplo, aquellos con forma cónica) pueden rectificar corrientes iónicas: la corriente iónica que atraviesa el canal en una dirección dada (estado “abierto”) es mayor que la obtenida al invertir la dirección del flujo iónico (estado “cerrado”) [1]. De esta forma, los nanocanales asimétricos son los análogos iónicos de los diodos empleados en electrónica para rectificar corrientes eléctricas. El fenómeno de rectificación iónica se estudia actualmente por sus aplicaciones en nuevos métodos de sensado y generación de energía, por lo cual es muy importante optimizarlo. 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 un nuevo enfoque teórico para abordar la optimización del fenómeno de rectificación iónica empleando técnicas de aprendizaje automático (*machine learning*). Específicamente, proponemos combinar un programa recientemente desarrollado en nuestro grupo que permite calcular muy eficientemente las corrientes iónicas a través de nanocanales de formas arbitrarias con la técnicas de optimización conocidas como *algoritmos genéticos*. Mediante este método, se buscará determinar la forma, dimensiones y distribución de carga del nanocanal que optimicen el factor de rectificación iónica (definido como el cociente entre las corrientes iónicas de los estados abierto y cerrado). Se compararán los resultados con aquellos producidos empleando métodos de optimización tradicionales (por ej., el método de Nelder-Mead), los cuales son muy propensos a encontrar mínimos locales. En una segunda etapa, se explorará el uso de redes neuronales (otra técnica de aprendizaje automático) para construir un modelo predictivo para el factor de rectificación en función de las propiedades del nanocanal.

Referencias:

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