

Identificación del proyecto

LEARNCAT

Nombre del proyecto

EXPLORACION DE HERAMIENTAS DE APRENDIZAJE AUTOMATICO EN CATALISIS COMPUTACIONAL PARA DISEÑAR TRANSFORMACIONES QUIMICAS SOSTENIBLES

Expediente numero

PID2021-128128NB-I00



Descripción del proyecto

El crecimiento de la demanda de nuevos materiales y energía es uno de los retos tecnológicos más importantes de la humanidad. En este contexto, la catálisis es una herramienta fundamental para el desarrollo de procesos químicos más eficientes, con menor impacto medioambiental. En este campo multidisciplinar, nuestra aportación proviene de la química computacional, la cual integramos con colaboraciones experimentales para entender los mecanismos de reacción y conducir al diseño racional de nuevos catalizadores. Con esta finalidad, exploraremos herramientas de aprendizaje automático (machine-learning, ML), que son consideradas una de las estrategias más útiles de la Inteligencia Artificial (IA), para la construcción de modelos de regresión y el desarrollo de potenciales atomísticos. Más allá de los métodos tradicionales basados en la caracterización de la Superficie de Energía Potencial, hemos utilizado y desarrollado métodos tipo Quantative Structure-Activity Relationship (QSAR). La evolución del modelado QSAR a ML implica en la práctica conjuntos de datos más amplios y relaciones matemáticas más complejas entre los descriptores y las propiedades catalíticas. No obstante, nuestro interés reside en la exploración y desarrollo de descriptores con significancia química que mantienen el compromiso con el proceso de comprensión, diseño, testeo y predicción, aproximaciones Joint Learning (JL). Pensamos, que estas aproximaciones jugarán un papel esencial en el desarrollo de la Catálisis Digital (CD), la cual tendrá un gran impacto en la Catálisis Industrial (CI).

El proyecto ha sido dividido en 3 Work Packages (WPs), los cuales están relacionados con tres tipos de catalizadores. Los WPs están relacionados metodológicamente mediante la incorporación de técnicas ML para el desarrollo de modelos de regresión y la optimización de campos de fuerza reactivos. El WP1 combina aproximaciones DFT y ML para el diseño racional de catalizadores moleculares para transformaciones selectivas. Pretendemos desarrollar una base de datos útil para ligandos de fósforo quirales y construir modelos predictivos ML. Este WP implica la exploración de descriptores 3D, incluyendo el desarrollo de otros nuevos basados en una aproximación libre de alineamiento centrada en el metal, y en las propiedades topológicas de densidad electrónica. También obtendremos la descripción de los mecanismos de reacciones como la hidroformilación catalizada por complejos de Pd, la borilación con diboros activados, y adiciones nucleofílicas de complejos de Cu alfa-borilalquenilo. El WP2 analiza clústeres metálicos soportados como catalizadores heterogéneos mediante DFT periódico y simulaciones con campos de fuerza reactivos (ReaxFF) parametrizados con métodos ML a través de una implementación propia de algoritmos genéticos hibridados con redes neuronales artificiales. En estos sistemas el gran número de isómeros accesibles requerirá una representación estadística del colectivo mediante simulaciones extensivas ReaxFF. Nuestro interés se centra en reacciones como la deshidrogenación de propano y la hidrogenación de CO₂. El WP3 combina simulaciones clásicas con ReaxFF explorando propiedades catalíticas y caotrópicas de óxidos moleculares y clústeres de boro. ReaxFF permitirá analizar estados de protonación y especiaciones en solución acuosa, evaluando la influencia en reacciones catalíticas como la descomposición de H₂O₂ y la reducción de enlaces S-S, así como su interacción con biomoléculas.

Financiación

Entidad financiadora

MCIN/ AEI /10.13039/501100011033/ y por FEDER Una manera de hacer Europa

Importe

102.850,00 €