

Potenciales interatómicos de aprendizaje automático y su aplicación a baterías de litio

Seminario de doctorado

Francisco FERNANDEZ

Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación (Universidad Nacional de Córdoba)



March 7, 2022

1 Introducción

Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

Potenciales interatómicos empíricos (FF)

Potenciales interatómicos de aprendizaje automático (ML)

2 Métodos

Descriptores

Distintos potenciales de ML

3 Aplicaciones en baterías de litio

Li_3PO_4

LiC

Li_xSi

4 Conclusiones

1 Introducción

Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

Potenciales interatómicos empíricos (FF)

Potenciales interatómicos de aprendizaje automático (ML)

2 Métodos

Descriptores

Distintos potenciales de ML

3 Aplicaciones en baterías de litio

Li_3PO_4

LiC

Li_xSi

4 Conclusiones

Introducción

Introducción: Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

Here is some rambling text

- 1 List item 1
- 2 List item 2

Introducción: Potenciales interatómicos empíricos (FF)

Introducción: Potenciales interatómico de aprendizaje automático (ML)

1 Introducción

Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

Potenciales interatómicos empíricos (FF)

Potenciales interatómicos de aprendizaje automático (ML)

2 Métodos

Descriptores

Distintos potenciales de ML

3 Aplicaciones en baterías de litio

Li_3PO_4

LiC

Li_xSi

4 Conclusiones

Métodos: Descriptores

Métodos: Distintos potenciales de ML

1 Introducción

Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

Potenciales interatómicos empíricos (FF)

Potenciales interatómicos de aprendizaje automático (ML)

2 Métodos

Descriptores

Distintos potenciales de ML

3 Aplicaciones en baterías de litio

Li_3PO_4

LiC

Li_xSi

4 Conclusiones

Aplicaciones en baterías de litio

1 Introducción

Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

Potenciales interatómicos empíricos (FF)

Potenciales interatómicos de aprendizaje automático (ML)

2 Métodos

Descriptores

Distintos potenciales de ML

3 Aplicaciones en baterías de litio

Li_3PO_4

LiC

Li_xSi

4 Conclusiones

Conclusiones