

| | |
|--------------|---|
| Títol | Optimització d'eines d'aprenentatge automàtic per a la interacció de C sobre superfícies de metalls de transició |
| Title | Optimizing Machine Learning Tools for the C interaction with Transition Metal Surfaces |

| | |
|--------------------------|--|
| Director | Dr. Sergi Vela i Dr. Francesc Viñes |
| Departament | Ciència de Materials i Química Física |
| Universitat | Universitat de Barcelona |
| Tutor¹ | |

| | |
|-------------|----------------|
| Curs | 2023-24 |
|-------------|----------------|

Summary²

The interaction of C with Transition Metals (TMs) is key in many aspects, from heterogeneous catalysis, through graphene synthesis in nanotechnology, up to the formation of transition metal carbide materials. Recent studies highlighted a series of properties determining the strength and position of C within TM surfaces, including d-band centre, surface energy and coordination number, as gained by Machine Learning (ML) tools, yet on a limited data set. The present study pretends aims at pushing the ML accuracy limits by widening and diversifying the data set, including classification algorithms, and considering subsurface properties, in order to make the analysis of C interaction with TM surfaces using ML tools a true and quantitative procedure.

Keywords³ Density Functional Calculations · Machine Learning · Carbon · Transition Metals · Surfaces · Adsorption · Diffusion

Breu descripció del projecte⁴

La interacció de carboni (C) amb les superfícies dels metalls de transició és d'una importància cabdal en diversos àmbits tecnològics; per exemple, els àtoms de C poden enverinar o bloquejar els llocs actius dels metalls nobles (Cu, Ni, Ag, Au) i la gran part dels metalls del grup del Pt (Pt, Pd, Ir, Rh), que s'empren molt en catalitzadors per a la transformació i síntesi de compostos orgànics senzills, actuant normalment com a fase activa. Però, petites quantitats de C poden actuar com a promotors, com s'ha trobat pel C subsuperficial en reaccions de hidrogenació en Pd [Teschner *et al. Science* **320** (2008) 86]. Estudis recents computacionals han trobat que el C subsuperficial és més comú de lo esperat [Piqué *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* **58** (2019) 1744], el que comporta un canvi de paradigma. A banda, els àtoms de C superficials poden agregar-se i formar estructures de carboni, típicament grafit, però també làmines de grafè, d'enorme interès per sintetitzar grafè d'alta qualitat [Zhao *et al. J. Phys. Chem. Lett.* **2** (2011) 759]. Per últim, el C pot incorporar-se a l'estructura del metall, formant carburs metàl·lics, especialment de metalls primerencs, emprats com a catalitzadors o materials molt resistent i refractaris [Hwu *et al. Chem. Rev.* **105** (2005) 185].

Tot lo anterior ha fet que l'estudi de la interacció de àtoms de C en superfícies metàl·liques esdevingui un node d'investigació, on val la pena destacar un estudi recent [Piqué *et al. ACS Catal.* **12** (2022) 9256], on s'han estudiat, en base a càlculs de la teoria del funcional de la densitat (*Density Functional Theory – DFT*) en models de llesca (*slab*), l'adsorció, absorció, i difusió de C en 81 superfícies de 27 metalls de transició, amb estructures cristal·lines tipus *face-centered cubic (fcc)*, *hexagonal close-packed (hcp)*, o *body-centered cubic (bcc)*, analitzant l'estabilitat i els diferents tipus de comportament mitjançant eines d'intel·ligència artificial (*artificial intelligence – AI*) i d'aprenentatge automàtic (*machine learning – ML*), trobant grups de metalls i superfícies amb comportament similar, i propietats de les superfícies que determinen la estabilitat, com el centre de la banda *d*, l'energia superficial, o el nombre de coordinació.

Però, l'anàlisi es va dur a terme sobre els llocs més estables, cosa que limità la base de dades, i la precisió de les eines de ML emprades. En aquest treball de fi de màster es pretén millorar els models de ML, incloent la regressió lineal multivariable, el *decision tree selector* (DTS), i el *random forest regressor* (RFR), per tal de maximitzar la precisió dels models ampliant la base de dades i afinant els *hyperparameters*. Tantmateix es planteja fer servir altres tipus de regressors de ML, així com combinar processos de classificació per esbrinar el lloc més estable, i després sobre aquesta tipologia, córrer models de ML quantitius per pronosticar l'energia d'interacció. Es considerarà també emprar altres tipus de descriptors o *features*, com el nombre de coordinació i el centre de banda *d* dels àtoms subsuperficials.

¹Si el director no és un professor de la UB o de la UPC, caldrà assignar un tutor del TFM que designarà la Comissió Coordinadora del Màster.

²Aquest "summary" és el que apareixerà a la futura pàgina web dedicada al TFM. Procureu que sigui concís i entenedor (màx. 10 línies).

³Aquestes "keywords" no només són les que apareixeran al web sinó que ajudaran la Comissió Coordinadora del Màster a assignar el projecte a un àrea concreta.

⁴Procureu ser concisos però proporcioneu prou informació per tal que l'estudiant i la Comissió Coordinadora del Màster es facin una idea prou acurada de en què consistirà el treball. Indiqueu 3-6 publicacions de referència en la descripció del projecte per donar una idea dels fonaments, metodologia, objectius, etc.

Competències addicionals⁵ (opcional)

Encara que no sigui estrictament necessari, coneixements previs de DFT i python facilitaran el TFM.

| Tasques a desenvolupar ⁶ | | Cronograma (setmanes) | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------------------------------------|---|-----------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| | | 01 | 02 | 03 | 04 | 05 | 06 | 07 | 08 | 09 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 |
| T01 | Bibliografia (20h) | x | x | | | | | | | | | | | | | | | | |
| T02 | Aprenentatge de VASP i Python (30h) | | x | x | x | x | | | | | | | | | | | | | |
| T03 | Familiarització amb <i>Machine Learning</i> (40h) | | | x | x | x | x | | | | | | | | | | | | |
| T04 | Càlculs de Descriptors (40h) | | | | x | x | x | x | | | | | | | | | | | |
| T05 | Ajust de models de ML (120 h) | | | | | | x | x | x | x | x | x | x | x | | | | | |
| T06 | Nous models de classificació i ML (80h) | | | | | | | | | x | x | x | x | x | x | x | | | |
| T07 | Avaluació de Resultats (70h) | | | | | | | | | | | | x | x | x | x | x | x | |
| T08 | Redacció de la Memòria (50h) | | | | | | | | | | | | | | x | x | x | x | x |
| T09 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| T10 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

Observacions i comentaris

Per a la realització del treball pròpiament dit es preveu una dedicació d'unes quatre hores diàries durant cinc dies a la setmana, amb la opció de modificació de l'horari per poder adaptar-se millor a l'horari acadèmic de l'estudiant.

Signatura (el directors del TFM)

Signatura (el tutor del TFM, si s'escau)

⁴ Enumereu breument qualsevol competència addicional a les competències genèriques enumerades en el Pla Docent del TFM (opcional).

⁵ Feu servir només les línies que calgui. Escolliu-les de manera que donin una idea aproximada de en què consistirà el treball i la seva distribució temporal.