

Formación de estructuras ordenadas de largo alcance a escala atómica, molecular y supramolecular (BLOSAMS)

El objetivo principal de este proyecto es estudiar mediante métodos computacionales la formación de estructuras ordenadas con propiedades ópticas inusuales en modelos sencillos de coloides. El tipo de estructuras ordenadas que estudiaremos incluye cristales aperiódicos y vidrios hiperuniformes. Los cristales se caracterizan por picos de Bragg intensos en el patrón de difracción e incluyen tanto cristales periódicos como aperiódicos. Ambos materiales presentan orden orientacional de largo alcance, pero solo los cristales periódicos pueden obtenerse replicando una celda unidad en las tres dimensiones del espacio. Por el contrario, los vidrios hiperuniformes son fases exóticas desordenadas con patrones de difracción isotrópicos sin picos de Bragg como los líquidos, pero en los cuales las fluctuaciones de densidad a largo alcance están suprimidas, conduciendo a funciones de scattering nulas a longitudes de onda bajas al igual que en los cristales periódicos y aperiódicos.

Recientemente hemos demostrado que se pueden obtener cristales aperiódicos mediante un diseño racional de modelos sencillos con interacciones direccionales. En este proyecto extendemos ese estudio a otros sistemas (partículas isótropas con interacciones competitivas y sistemas de varios componentes), con el fin de descubrir nuevos cristales aperiódicos y estudiar sus propiedades estructuras y fotónicas.

Por otro lado, es conocido que modelos sencillos de coloides con interacciones atractivas a corto alcance (típicamente asociadas a depleción) e interacciones repulsivas de largo alcance (usualmente de origen electrostático) forman agregados cuya distribución de tamaños depende del balance de las interacciones atractivas y repulsivas. Curiosamente simulaciones preliminares en nuestro grupo muestran que bajo ciertas condiciones, se pueden obtener estados vítreos de agregados gigantes que son hiperuniformes. Esto abre la vía al diseño de materiales invisibles en dos intervalos de longitud de onda, modulando la estructura intra- e inter-agregado.

El estudio de la formación de este tipo de materiales es interesante desde un punto de vista fundamental, pero también desde el punto de vista aplicado. Estos materiales presentan propiedades ópticas inusuales que los hacen especialmente adecuados en diferentes aplicaciones. Predicciones teóricas apuntan a que los cristales aperiódicos coloidales pueden presentar una banda prohibida en el rango de frecuencias visibles con simetría casi esférica (como consecuencia de la alta simetría rotacional de los cristales aperiódicos). De este modo se podría construir dispositivos fotónicos que no dependen de la orientación del material. Los vidrios hiperuniformes son invisibles para radiaciones por encima de cierta longitud de onda, lo que podría utilizarse en aplicaciones en defensa o en aeronáutica para diseñar aviones con mejores aislamientos térmicos y/o acústicos.

Los objetivos específicos que se abordarán son:

1. Estudio de las características de las interacciones entre partículas para obtener cristales aperiódicos:

- Descubrimiento de cristales aperiódicos utilizando modelos sencillos
- Estudio de las propiedades estructurales y ópticas de cristales aperiódicos.

2. Estudio del orden emergente en ensamblados supramoleculares de agregados gigantes:

- Caracterización de la formación de agregados gigantes en modelos de coloides con interacciones competitivas
- Diseño de estados vítreos de agregados hiperuniformes: materiales invisibles en dos escalas.

Publicaciones relevantes:

E.G. Noya, C.Wong, P. Llombart and J.P.K. Doye, *How to design an icosahedral quasicrystal through directional bonding*, Nature **596**, 367 (2021).

E.G. Noya, I Zubieta, D. Pine and F. Sciortino, *Assembly of clathrates from tetrahedral patchy colloids with narrow patches*, J. Chem. Phys. **151**, 094502 (2019).

E.G. Noya, N.G. Almarza and E. Lomba, *Assembly of trivalent particles under confinement: from an exotic solid phase to a liquid phase at low temperature*, Soft Matter **13**, 3221 (2017).

Z. Ma, E. Lomba and S. Torquato, *Optimized large hyperuniform binary colloidal suspensions in two dimension*, Phys. Rev. Lett. **125**, 068002 (2020).

Historial del grupo:

La tesis se desarrollará en el grupo de Simulación Molecular y Modelización en el Instituto de Química-Física Blas Cabrera bajo la dirección de Eva González Noya y Enrique Lomba. El grupo cuenta actualmente con 3 estudiantes de doctorado trabajando en problemas de ensamblado de sistemas coloidales, en simulación de agua y disoluciones acuosas y en el estudio de la dinámica y estructura de líquidos iónicos en presencia de electrodos. El grupo tiene una amplia red de colaboraciones internacionales y recibe con frecuencia visitantes de universidades extranjeras, ofreciendo un marco muy adecuado para el desarrollo de la tesis doctoral.

Plan de formación:

El doctorando estará adscrito al programa de Doctorado en Materia Condensada, Nanotecnología y Biofísica de la UAM. Se formará en técnicas de simulación (MD y MC) y en lenguajes de programación (FORTRAN, CUDA, python, ..), así como en técnicas de aprendizaje automático basado en datos. Dado que en la mayoría de los planes de estudios universitarios hay una escasez considerable de asignaturas relacionadas con el análisis numérico y la programación, por no hablar de la simulación numérica, será esencial que el doctorando realice cursos en escuelas especializadas (véase más adelante). Estos cursos se complementarán con una formación específica impartida por el equipo de investigación para desarrollar sus conocimientos numéricos y de programación con el fin de comprender el software necesario para llevar a cabo las tareas de este proyecto, depurarlo en caso necesario o desarrollar nuevos códigos a medida para objetivos específicos que vayan mucho más allá del uso de paquetes de simulación estándar. Esto será un activo importante en su instrucción como futuro investigador (además de una mejor formación en Física Estadística y de la Materia Condensada), pero también representa un valor añadido en campos tecnológicos en

los que se requiere una gestión y un procesamiento intensivos de datos. Planeamos que el estudiante realice dos estancias breves con líderes en el campo, por ejemplo, en Bristol (Nigel Wilding), Princeton (S. Torquato), Oxford (J. Doye), Utrech (M. Dijkstra, L. Fillion), Petr Sulc (Arizona State University), dependiendo de las preferencias del estudiante.

Además de la formación a través de la investigación (reuniones periódicas con el equipo investigador), tenemos previstas varias actividades formativas, como la asistencia a escuelas de simulación (por ejemplo, la escuela MolSim organizada por CECAM, <https://www.cecarn.org/workshop-details/1236>) y a talleres (por ejemplo, el organizado por la Red Española de Simulación que coordina EGN, IP de esta propuesta, está específicamente diseñado para dar la oportunidad a los estudiantes de hacer presentaciones orales de sus trabajos, <https://rdsimulacion.iqf.csic.es>). Se promoverán las habilidades de presentación y divulgación fomentando su participación en las actividades de divulgación del grupo.

El IQF también ofrece un entorno excelente para los estudiantes de doctorado. Acoge a 14 grupos interdisciplinarios cuya investigación está orientada a resolver retos en salud, biotecnología, nuevos materiales y ciencias medioambientales. El IQF organiza una excelente serie de seminarios en los que participan los científicos españoles más destacados. También se anima al estudiante a participar en las actividades organizadas por el IQF y el CSIC, como, por ejemplo, el concurso anual «Yo investigo. Yo soy CSIC» y el IQF PhD Day, en el que los estudiantes hacen breves presentaciones de sus investigaciones.

CURRICULUM VITAE ABREVIADO (CVA)

IMPORTANT – The Curriculum Vitae cannot exceed 4 pages. Instructions to fill this document are available in the website.

Part A. PERSONAL INFORMATION

| | | | |
|------------------------------------------------|----------------------|-------------------------|------------|
| First name | Eva | | |
| Family name | González Noya | | |
| Gender (*) | Female | Birth date (dd/mm/yyyy) | 20/08/1976 |
| Social Security, Passport, ID number | 33297006K | | |
| e-mail | Eva.noya@iqf.csic.es | URL Web https: | |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*) | 0000-0002-6359-1026 | | |

(*) Mandatory

A.1. Current position

| | | | |
|-------------------|-----------------------------------------------------------|----------------|-----------|
| Position | Research scientist (Investigadora Científica) | | |
| Initial date | 16/02/2021 | | |
| Institution | Consejo Superior de Investigaciones Científicas | | |
| Department/Center | Instituto de Química-Física Blas Cabrera | | |
| Country | Spain | Teleph. number | 654921430 |
| Key words | Physical chemistry, molecular simulation, phase behaviour | | |

A.2. Previous positions (research activity interruptions, indicate total months)

| Period | Position/Institution/Country/Interruption cause |
|-----------------------|----------------------------------------------------------|
| 01/10/2009-15/02/2021 | Staff scientist. IQF/CSIC. |
| 01/01/2011-31/12/2011 | Visiting scholar. University of Chicago |
| 01/12/2016-30/09/2009 | Juan de la Cierva postdoctoral fellow. U. Complutense |
| 01/10/2004-30/09/2006 | Postdoctoral fellow. University of Cambridge. |
| 15/06/2012-20/12/2012 | Predocctoral short stay. NASA Ames Research Center (USA) |
| 01/06/2011-23/12/2011 | Predocctoral short stay. University of Kentucky. |
| 01/06/2000-30/05/2004 | PFI PhD student |

A.3. Education

| PhD, Licensed, Graduate | University/Country | Year |
|---------------------------------|----------------------------------------|------|
| Degree in Physics | Universidade de Santiago de Compostela | 1999 |
| PhD in Condensed Matter Physics | Universidade de Santiago de Compostela | 2004 |

(Include all the necessary rows)

Part B. CV SUMMARY (max. 5000 characters, including spaces)

During more than twenty years of career, my research has focused on numerous topics, always studied using computational means. One of the most relevant contributions was the development of methods for the calculation of phase diagrams by simulation, where we have published several articles describing the details of thermodynamic integration and direct coexistence methods which have helped to popularize their use in the simulation community. Recently, I served as the guest editor for the “Fluids meet solids” Special Topic of the Journal of Chemical Physics, aimed precisely at summarizing the main recent advancements and challenges in this field. In the assembly of simple models of colloids with directional interactions, we have proposed design rules to produce materials with suitable properties for applications in photonics, such as diamond and graphene colloidal crystals, and most importantly, icosahedral aperiodic crystals. This finding, published in Nature in 2021 and



presented in invited talks at 4 international and 3 national conferences, showed for first time that icosahedral quasicrystals can form in non-metallic systems.

I have also made numerous contributions to other topics, such as in the assessment of the relevance of nuclear quantum effects on the properties of water, on the characterization of the ice-vapour interface, and on adsorption in nanoporous materials, among others. All this has been possible thanks to a large network of national and foreign collaborators, such as J. Doye (U. Oxford), C. Vega, L. MacDowell and E. Sanz (U. Complutense), P. Schall (U. Amsterdam), G. Kahl, Emanuela Bianchi (U. Vienna), W. Gozdz (Polish A. of Sciences), F. Sciortino (U. Sapienza), G. Voth (U. Chicago), L. Liz-Marzán (CIC biomaGUNE) and E. Lomba (IQF).

I have been principal investigator of 3 national projects and of a RISE-Marie Curie (coordinated by Poland). Recently, I have taken on the role of coordinator of the Spanish Network funded by the call for Research Networks 2022, and which brings together 15 Spanish simulation groups. Since June 2020 I am Head of the Department of Chemistry-Physics of Materials at IQF. My scientific activity has been positively evaluated by the CNEAI (3 sexenios: 2001-2006, 2007-2012, 2013-2018) and by the Component for Research Merits (4 quinquenios: 2001-2005, 2006-2010, 2011-2015, 2016-2020).

I am a member of the scientific committee of the Física Estadística national conference and of the steering committee of GEFENOL (Statistical Physics and Non-Linear Physics) specialized group of the Royal Spanish Society of Physics

I have co-directed 4 doctoral theses and I am currently the advisor of two other PhD students. The three egressed students now have successful careers in industry and academia (two of them hold postdoctoral positions, one funded by the Marie Curie individual fellowship program, and the third one is a data scientist manager at Wise Athena). I have also hosted 5 predoctoral students on short stays, both from Spanish and foreign universities. I have been responsible for 2 postdoctoral students, 3 undergraduate and 6 master's degree final projects, 5 of which were students of the Master in Molecular Simulation (UNIA, UHU) in which I am the professor responsible for the Advanced Monte Carlo course.

I am frequent referee of several journals in the field, such as the Journal of Chemical Physics, Soft Matter, Physica Review, Nature Physics, etc. (about 10 articles per year). I am also frequent evaluator of the Marie Curie Individual fellowships.

Many of these results have been communicated to society, either in science festivals (such Science Week, the Nanofestival and the International Day of Women and Girls in Science) and in press releases made in collaboration with CISC's communications department.

I have published 94 articles, including 1 Nature, 1 Science, 2 Nat. Comm., 1 Sci. Adv., and 1 PRL. These articles have been cited more than 3300 times, 3100 excluding self-citations, resulting in an average of 35 citations/article (ISI web of Knowledge) and an average of 288 citations year in the last five years. My h-index is 30 according to ISI and 33 according to Scholar.

Part C. RELEVANT MERITS (sorted by typology)

C.1. Publications (see instructions)

1. C.P. Lamas, E. Sanz, C. Vega and E.G. Noya, *Estimation of bubble cavitation rates in a symmetrical Lennard-Jones mixture by NVT seeding simulations*, J. Chem. Phys. **158**, 124109 (2023). **Corresponding author**.
2. C.P. Lamas, C. Vega, and E.G. Noya, *Freezing point depression of salt aqueous solutions*, J. Chem. Phys. **156**, 134503 (2022). **Corresponding author. Featured in the section Most Read (> 11,000 views)**.
3. E.G. Noya, C.Wong, P. Llombart and J.P.K. Doye, *How to design an icosahedral quasicrystal through directional bonding*, Nature **596**, 367 (2021). **Corresponding author**.
4. H. Serna, A. Díaz-Pozuelo, E.G. Noya and W. Gozdz, *Formation and internal ordering of periodic microphases in colloidal models with competing interactions*, Soft Matter **17**, 4957 (2021). **Corresponding author**. 8 citations.



5. E.G. Noya, I Zubieta, D. Pine and F. Sciortino, *Assembly of clathrates from tetrahedral patchy colloids with narrow patches*, *J. Chem. Phys.* **151**, 094502 (2019). **Corresponding author.**
6. I. Zubieta, M. Vazquez del Saz, P. Llombart, C. Vega and E. G. Noya, *Nucleation of pseudo-hard spheres and dumbbells at moderate metastabilities: appearance of A15 Frank-Kasper phase at intermediate elongations*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 1656-1670(2019). **2018 Hot Paper Collection and featured at the journal front back cover. Corresponding author.**
7. P. Prslja, E. Lomba, P. Gómez-Álvarez, T. Urbic and E.G. Noya, *Adsorption of water, methanol and its mixtures within graphite slit pores*, *J.Chem.Phys.* **150**, 024705 (2019). **Corresponding author.**
8. E.G. Noya, N.G. Almarza and E. Lomba, *Assembly of trivalent particles under confinement: from an exotic solid phase to a liquid phase at low temperature*, *Soft Matter* **13**, 3221 (2017). **Corresponding author. Article featured in the journal's cover.**
9. E.G. Noya, C. Vega, J.P.K. Doye and A.A. Louis, *The stability of a crystal with diamond structure for patchy particles with tetrahedral symmetry*, *J. Chem. Phys.* **132**, 234511 (2010). **Corresponding author.** 102 citations.
10. E.G. Noya, C. Vega and E. de Miguel, *Determination of the melting point of hard spheres by direct coexistence simulations*, *J. Chem. Phys.* **128**, 154057 (2008). **Corresponding author.** 100 citations.

C.2. Congress, indicating the modality of their participation (invited conference, oral presentation, poster)

1. *Uncovering the assembly of colloids with directional bonds by computer simulation*, **Invited talk** at the workshop: ZCAM and CECAM: Present and future, Zaragoza, June 2023.
2. *A one-component icosahedral quasicrystal formed by particles with directional bonds*. **Invited talk** at the 1st Spanish Soft Matter 1 1/2 Day, Benasque, October 2023.
3. *How to obtain ordered materials using anisotropic colloids*. **Invited talk** at the XVIII Encuentro Interbienio del Grupo Especializado de Termodinámica de las Reales Sociedades Españolas de Física y Química, Seville, October 2023.
4. *Icosahedral quasi-crystals made of patchy colloids*. **Invited talk** at the 36th European Colloid & Interface Society Conference (ECIS 2022). Chania, Greece, September 2022.
5. *Making icosahedral quasicrystals with patchy particles*. **Invited talk** at the CECAM workshop: Complex colloidal crystals: Formation, inhomogeneities and defects. Vienna, Austria July 2022.
6. *Making icosahedral quasicrystals with patchy particles*. **Invited talk** at the 10th International Conference on Aperiodic Crystals, Hokkaido, Japan, June 2022.
7. *Making complex ordered structures with patchy particles*. **Invited talk** at the workshop: From water to colloidal water: a journey into liquids and soft matter physics. Rome, June 2022.
8. *Assembly of clathrates from tetrahedral patchy colloids with narrow patches*. **Contributed talk** at the 5th International Soft Matter Conference (ISMC2019). Edinburgh, June 2019.
9. *Quantum effects in water clusters: role of the molecular flexibility and applicability of quantum thermal baths*, **Invited talk** at 7th International Symposium "Atomic Cluster Collisions" ISACC 2015, Madrid, July 2015.
10. *Phase behaviour and assembly of inverse patchy colloids*, **Invited talk** at CECAM workshop Physics of colloidal particles with heterogeneously pattern surfaces, Vienna, September 2024.



C.3. Research projects, indicating your personal contribution. In the case of young researchers, indicate lines of research for which they have been responsible.

1. *Aggregation and emergent order in soft and biological matter* (PID2020-115722GB-21). Funded by AEI (Ministerio de Ciencia e Innovación). Budget: 45,000 euros. Start/end dates: 01/09/2021-31/08/2024. **Principal Investigator and Coordinator**.
2. *Spanish Molecular Simulation Network* (RED2022-134276-T). Program “Red Temática “, AEI (Ministerio de Ciencia e Innovación). Budget: 20,300 euros. Period: 01/06/2023-31/05/2025. **Principal Investigator**.
3. *Self-assembly and network forming systems* (FIS2017-89361-C3-2-P). Funded by AEI (Ministerio de Ciencia e Innovación). Budget: 45,000 euros. Start/end dates: 01/01/2018-30/09/2021. **Principal Investigator from CSIC**.
4. *Effects of confinement on inhomogeneous systems* (CONIN_RISE). Funder by EU, MCSA-RISE. Budget (for CSIC only): 202,500 euros. Start/end dates: 01/01/2017-31/12/2021. **Principal Investigator from CSIC**.
5. *Design of colloidal quasicrystals using anisotropic particles*, Program Explora, Mineco (FIS2015-72946-EXP). Funding: 40,000 euros. Period: 01/05/2017-31/04/2019. **Principal Investigator**.
6. *Theory and simulation of complex systems* (FIS2013-47350-C5-4-R), Funded by Dirección General de Investigación (Ministerio de ciencia y tecnología). Budget: 70,000 euros. Start/end date: 01/01/2014-31/12/2017. IP of the project: Noé G. Almarza. Role: Member of the **research team**. Responsible for the calculation of phase behaviour of colloidal models with competing interactions.
7. *Physical processes in confinement conditions: adsorption, self-assembly and phase transitions in porous media* (FIS2010-15502). Funded by Dirección General de Investigación (Ministerio de ciencia y tecnología). Budget: 108,500 euros. Start/end dates: 01/01/2011-31/12/2014. IP of the project: Enrique Lomba. Role: Member of the **research team**. Responsible for the simulation studies of adsorption of gases in zeolites and of the phase diagram of simple colloidal models with directional interactions.

C.4. Supervision of PhD Theses

1. *Molecular simulations of colloidal quasicrystal models*. **Cosmin Dicu**. Supervisor: Eva G. Noya. Universidad Complutense de Madrid. Since January 2024.
2. *Molecular simulation studies: force-field development, phase equilibria and nucleation*. **Lucía Fernández-Sedano**. Supervisors: C. Vega and E.G. Noya, Universidad Complutense de Madrid. Since September 2022.
3. *Thermodynamic and kinetic study of phase changes by molecular simulation*. **Cintia Pulido Lamas**. Supervisors: C. Vega, E. Sanz and E.G. Noya. Universidad Complutense de Madrid. 15th February 2024.
4. *Confinement effects on systems with competing interactions*. **Horacio Serna**. Supervisors: W. Gozdz and E.G. Noya. Polish Academy of Sciences. April 2021.
5. *Molecular structure and crystal habits in complex solid interfaces: a molecular simulation study*. **Pablo Llombart**. Supervisors: L.G. MacDowell and E.G. Noya, Universidad Complutense de Madrid. October 2019.
6. *Reverse Monte Carlo modelling and Monte Carlo simulation of adsorption processes on zeolites*. **Vicente Sánchez-Gil**. Supervisors: Eva G. Noya and J.M. Guil. Universidad Autónoma de Madrid. January 2017.