



PREDIÇÕES DE ESTRUTURAS CRISTALINAS – APLICAÇÕES DOS SOFTWARES USPEX E XTALOPT

DINIZ, André Gomes¹ (andreg.diniz97@hotmail.com); **FACCIN, Giovani Manzeppi²**
(GiovaniFaccin@ufgd.edu.br).

¹Discente do curso de Engenharia de Computação da FACET – Faculdade de ciências exatas e tecnologia;

²Orientador e docente da FACET – Faculdade de ciências exatas e tecnologia;

A predição de estruturas cristalinas de um determinado composto, baseando-se apenas em sua composição, tem sido o grande objetivo de vários cientistas desde a década de 90, tendo uma grande relevância na ciência acadêmica e industrial. Com o uso de diversas técnicas computacionais, procura-se alcançar esse objetivo. Dentre as técnicas utilizadas podemos citar: algoritmos evolutivos, análise multipolar distribuída, amostragem aleatória, mineração de dados e muitas outras. Este trabalho abordou a temática do estudo da predição de estruturas cristalinas com os softwares USPEX e XtalOpt, que fazem uso de algoritmos evolucionários para realizar a predição das estruturas desejadas, juntamente com o otimizador GULP. Algoritmos evolucionários ou algoritmos genéticos fazem uso da teoria evolutiva baseada na biologia levando em consideração as técnicas de mutação, hereditariedade, seleção natural e recombinação. Assim, quando iniciamos o processo de otimização de um agregado atômico ou estrutura de cristal, a aplicação do algoritmo evolucionário com uma estratégia de elitismo resulta na preservação das melhores configurações estruturais, as quais passam para a próxima etapa de otimização, garantindo que, após várias etapas, seja possível obter a melhor estrutura cristalina de acordo com os dados fornecidos inicialmente para o software. O otimizador GULP foi criado como objetivo de realizar simulações de dinâmica molecular com foco na modelagem de materiais, com ele podemos modelar sistemas de estado sólido (metais, cerâmicas, óxidos), granulares ou macroscópicos atômicos, poliméricos e biológicos usando uma variedade de potenciais interatômicos (campos de força) podendo modelar sistemas 2D ou 3D com apenas algumas partículas, milhões ou até bilhões. Para modelar a interação entre os átomos, foi utilizado o campo de forças de Lennard-Jones, responsável por descrever as forças de atração e repulsão entre os átomos da estrutura analisada. Foram realizados ensaios computacionais com o potencial de Lennard-Jones para agregados pequenos (nanoagregados) com número de átomos entre 2 e 36 com o objetivo de verificar a estrutura cristalina prevista por estes sistemas e compará-las com as referências estudadas. Após as verificações podemos constatar que o software USPEX conseguiu chegar na estrutura cristalina e energia estabelecidas na literatura estudada dentro de uma precisão de milielétron-volt (meV). Os resultados encontrados possibilitam, em um trabalho futuro, a troca do potencial de Lennard-Jones por outros modelos mais realistas e sua aplicação ao estudo de compostos de interesse na ciência dos materiais.

Palavras-chave: Otimização, Cristais, Algoritmos evolutivos.

Agradecimentos: Ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) da Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD) pela concessão de bolsa de iniciação científica ao primeiro autor.