

Predicción de estructuras cristalinas empleando Algoritmos Genéticos, a partir del diagrama de enlaces químicos de la molécula aislada.

Gabriel I. Pagola^{1*}, Marta B. Ferraro¹, Albert M. Lund^{2,3}, Anita M. Orendt³, Julio C. Facelli^{3,4}

¹-Departamento de Física, e Ifiba (CONICET) Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires.

²-Department of Chemistry, University of Utah, Salt Lake City, USA.

³-Center for High Performance Computing, University of Utah, Salt Lake City, USA

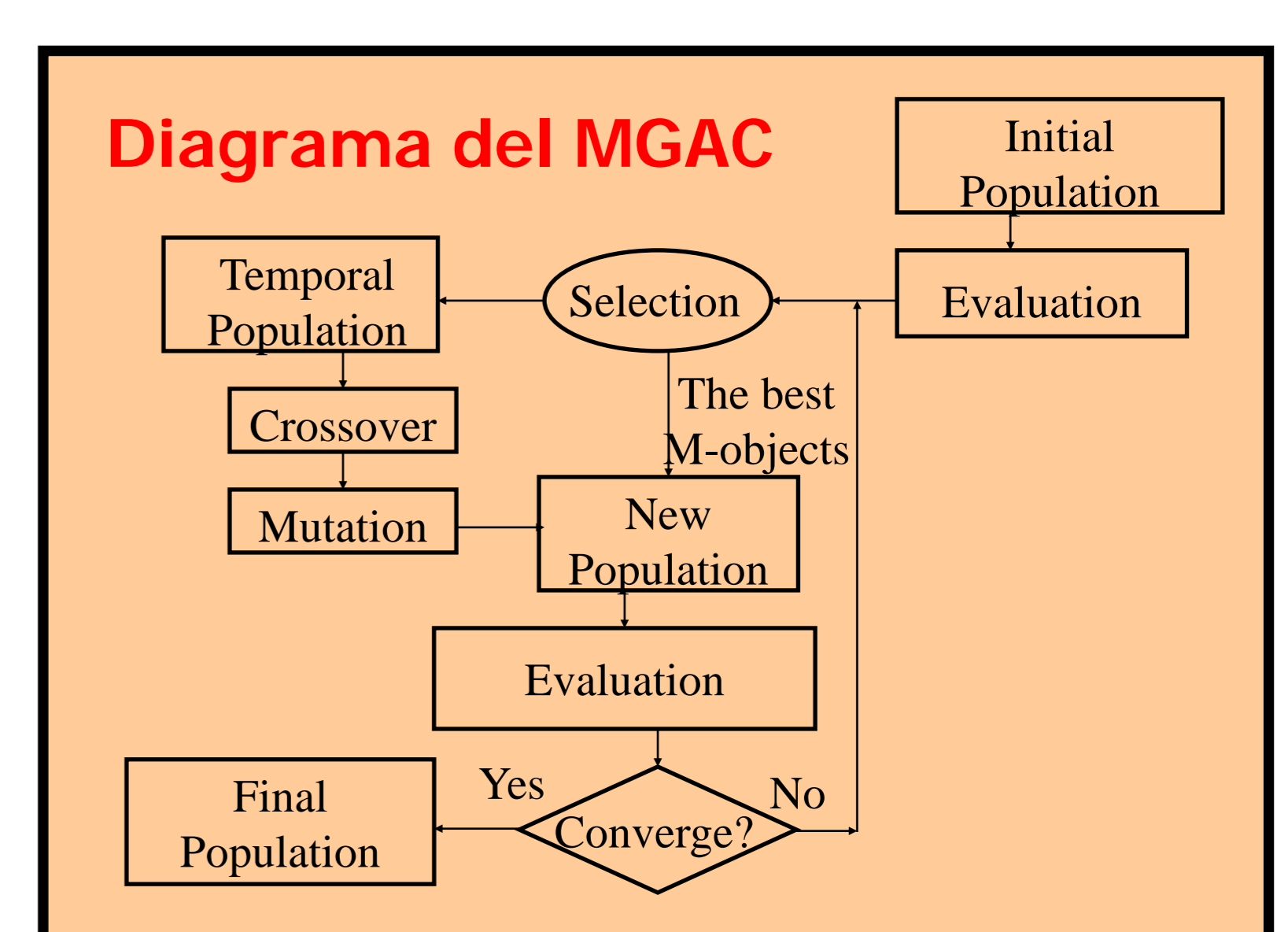
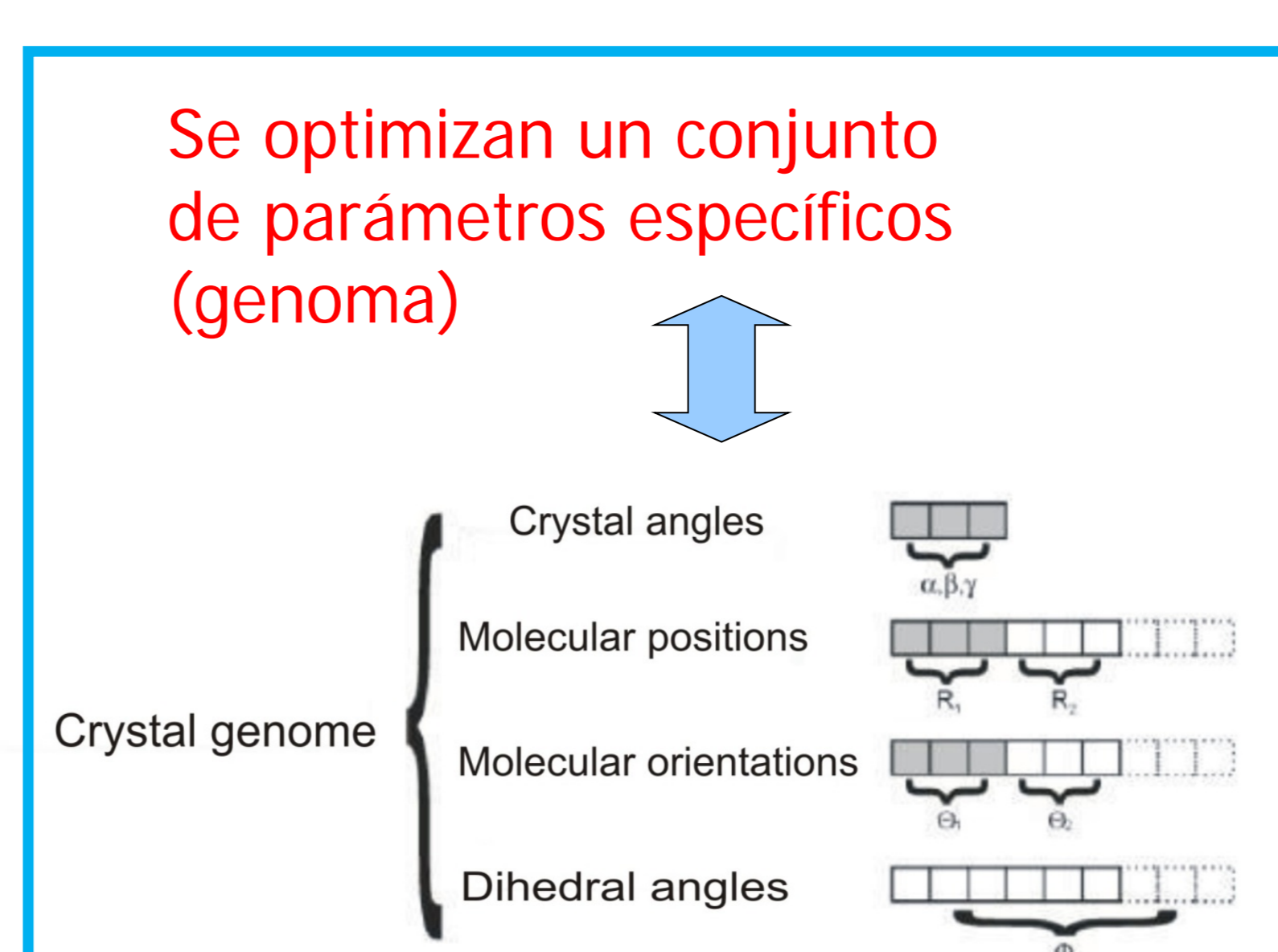
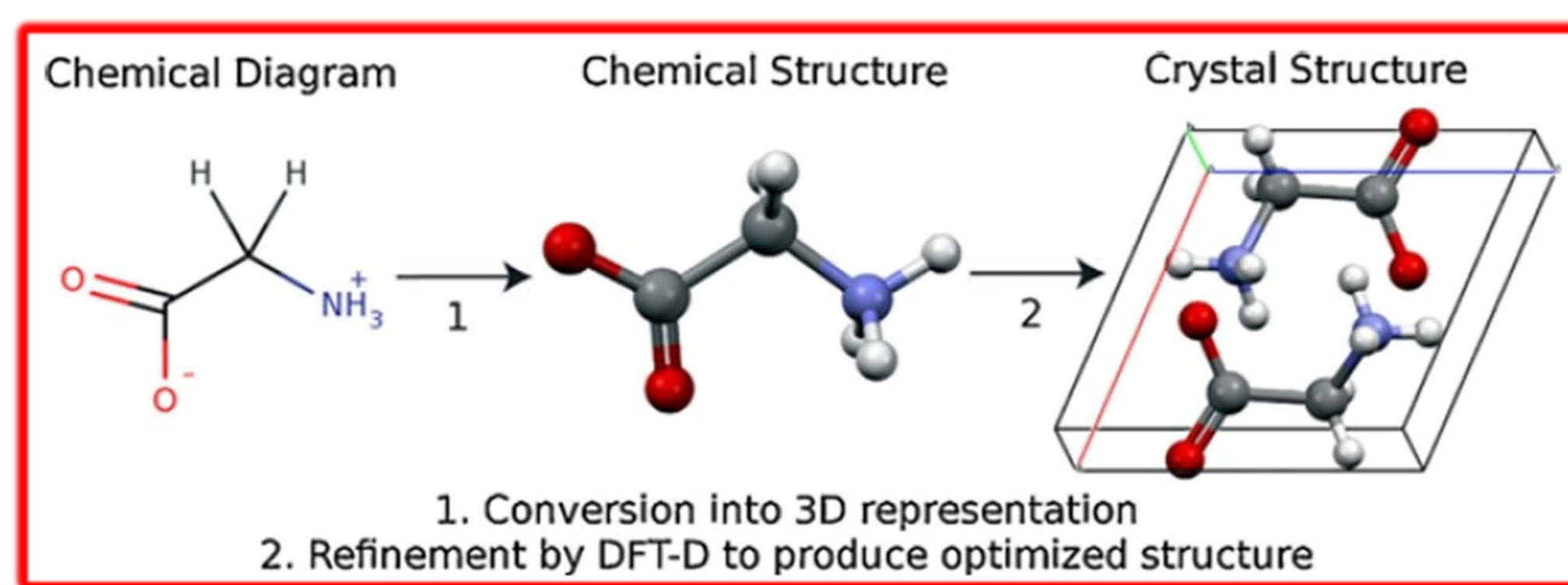
⁴-Department of Biomedical Informatics, University of Utah, Salt Lake City, USA

*E-mail: gpagola@df.uba.ar

Durante los últimos 15 años nuestro grupo trabaja en la predicción de estructuras cristalinas y la determinación de sus propiedades mediante el desarrollo y aplicación de un código propio denominado MGAC (Modified Genetic Algorithms for Crystals). Dicho código es capaz de efectuar búsquedas de estructuras plausibles, usando algoritmos genéticos distribuidos (GA), para cristales con moléculas que pueden adoptar diferentes conformaciones (flexibles). El código efectúa una minimización local de estas estructuras para cada grupo cristalográfico relevante, las clasifica según su energía y rescata las más relevantes.

La versión actual del MGAC emplea el código Quantum Espresso (QE) permitiendo efectuar las optimizaciones locales y los cálculos de las energías de los cristales candidato al nivel DFT-D (dispersion-corrected density functional theory).

En este trabajo se muestra la *predicción* de 3 de los polimorfos de la glicina, es decir la obtención de las correspondientes estructuras cristalinas de los polimorfos tomando como información inicial únicamente el diagrama de uniones químicas de la molécula aislada. Los polimorfos estudiados son α -glycine, β -glycine y γ -glycine que pertenecen a grupos cristalográficos distintos, siendo estos $P2_{1/C}$, $P2_1$ y $P3_1$. Aplicando el MGAG y haciendo separadamente la correspondiente *predicción* para cada uno de estos grupos cristalográficos, en los 3 casos se ha obtenido que la estructura cristalina con la más baja energía es la que mejor ajusta a los datos experimentales del correspondiente polimorfo (con un *RMS* del orden de 0.2 para β -glycine y del orden de 0.09 para los otros 2 polimorfos).



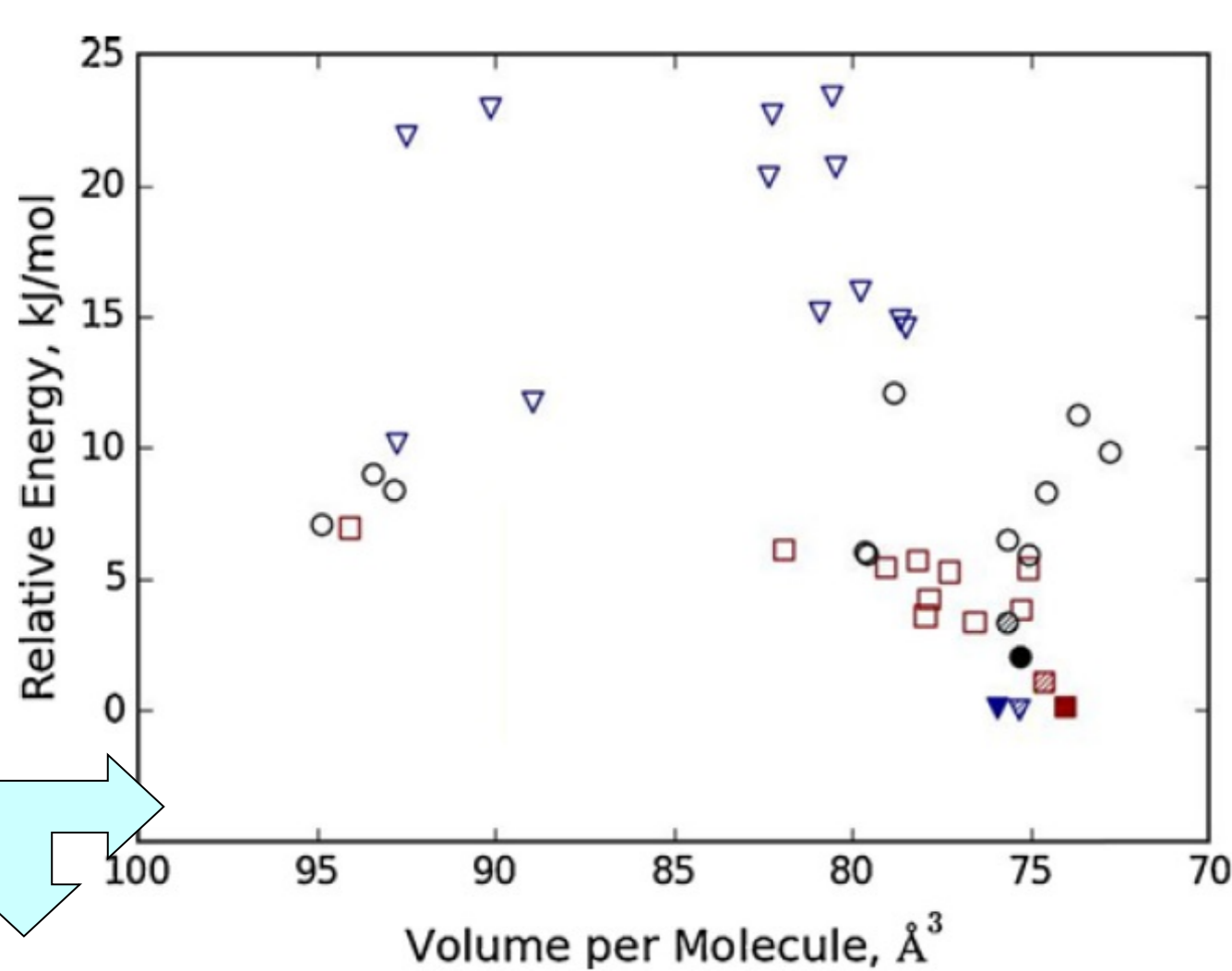
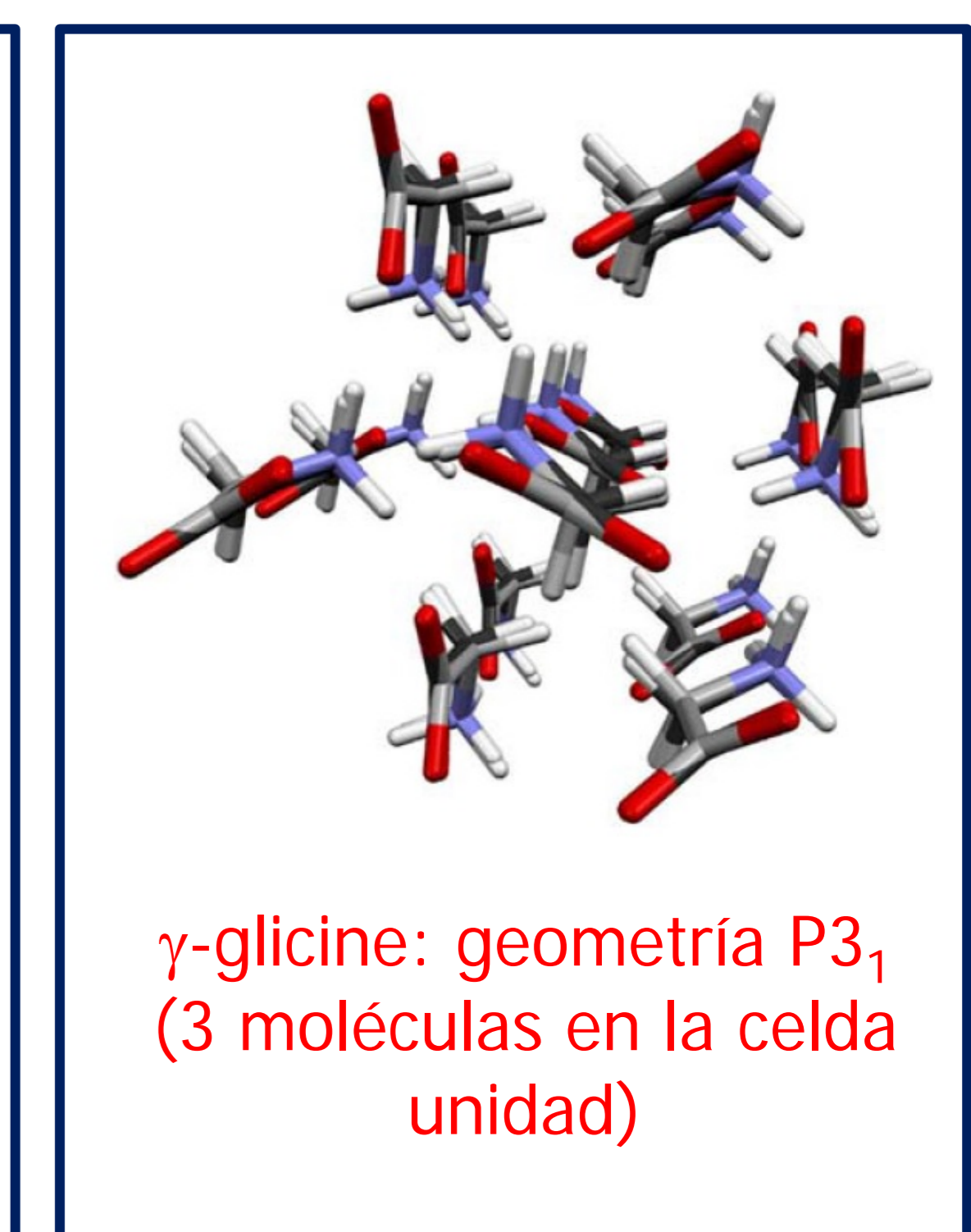
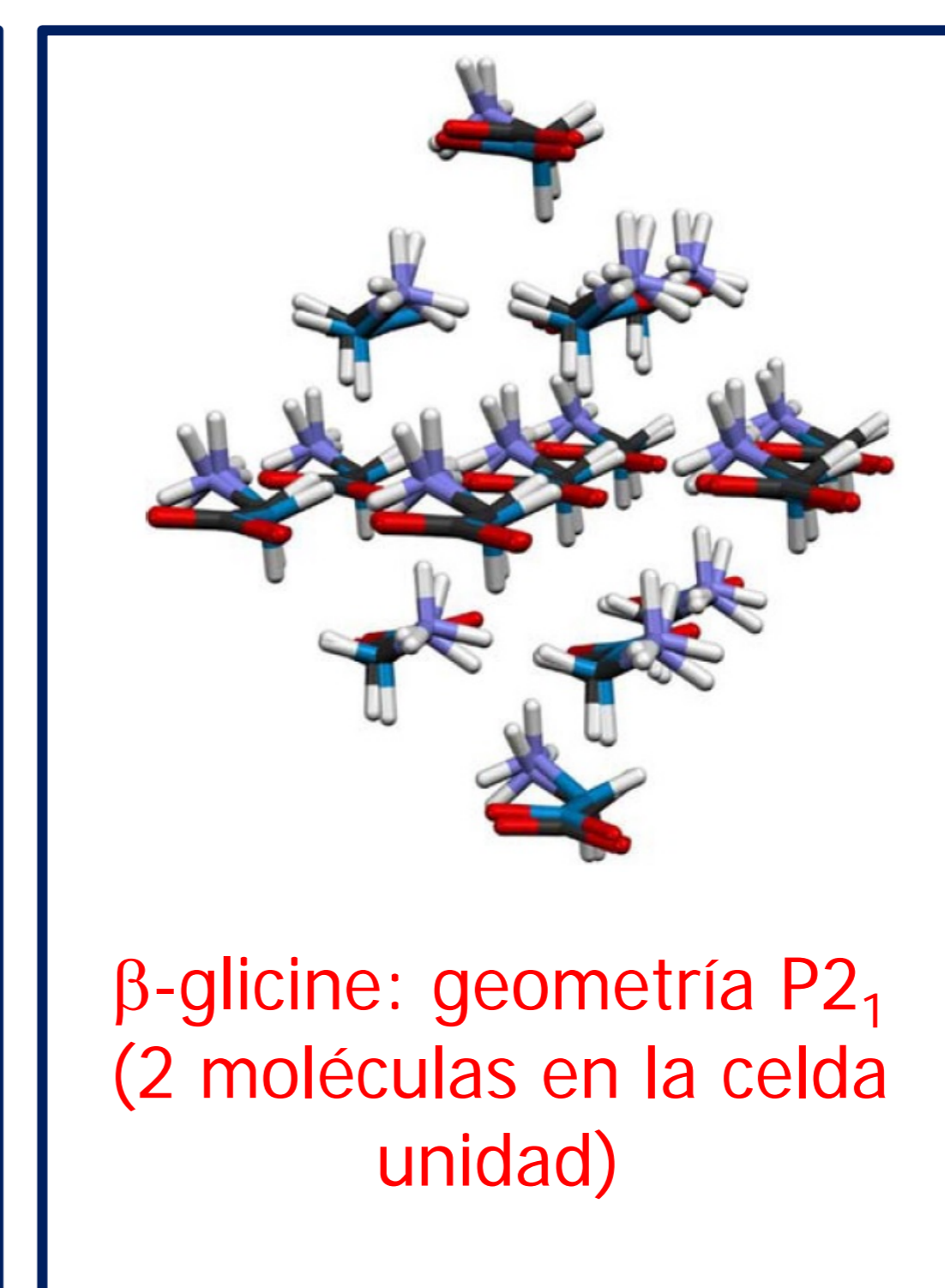
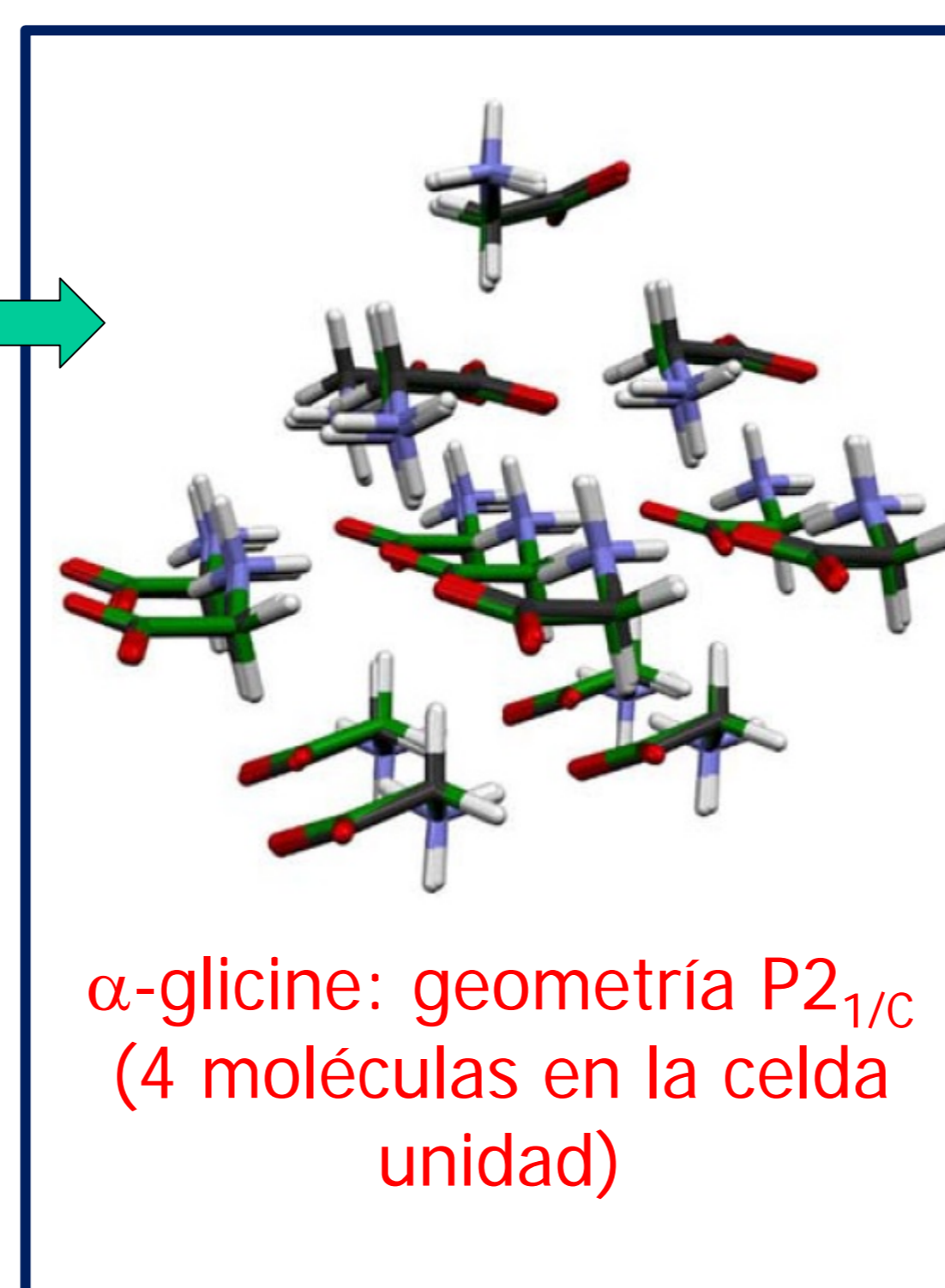
Objetivo: predecir la estructura cristalina a partir del conocimiento del diagrama de la molécula

MGAC emplea un algoritmo genético (elitista). Criterio de selección de las mejores estructuras cristalinas (*función de aptitud*): aquellos con menor energía. Se parte de una población inicial al azar. En cada generación se crean nuevos individuos (cristales), mezclando los *genes* de los mejores individuos de la generación anterior.

Polymorph	SPG	Energy ^d	Cell parameters ^e						RMS ^f
			a	b	c	α	β	γ	
α -Glycine	$P2_{1/C}$	-147 663.00	5.0517	11.7146	5.7965	90.0	120.3102	90.0	0.097
			5.0874	11.7817	5.4635	90.0	112.0530	90.0	
β -Glycine	$P2_1$	-147 661.12	5.6840	6.0727	5.0305	90.0	119.8711	90.0	0.199
			5.3880	6.2760	5.0905	90.0	113.1200	90.0	
γ -Glycine	$P3_1$	-147 663.07	6.9166	6.9166	5.4983	90.0	90.0	120.0	0.087
			7.0383	7.0383	5.4813	90.0	90.0	120.0	

Tabla: ^{a, b, c} estructura experimental del correspondiente polimorfo ^d en Kcal/mol ^e longitudes en Å, ángulos en °

Para cada polimorfo: comparación entre la estructura cristalina experimental (en negro) con la estructura de menor energía obtenida con el MGAC-QE



Distribución de energías de las estructuras cristalinas candidato obtenidos por el MGAC-QE en función del Volumen por Molécula. Los cuadrados, círculos y triángulos representan las estructuras cristalinas con geometrías $P2_{1/C}$, $P2_1$ y $P3_1$ respectivamente. Relleno *solido*: estructura MGAC-QE con menor energía. Relleno a rayas: estructura experimental

- Para cada grupo cristalográfico, se trabajó con poblaciones de 120 individuos y se corrieron 50 generaciones.
- Esta versión del código MGAC que emplea como *función de aptitud* el código QE (nivel DFT-D) permitió *predecir* los polimorfos α , β y γ de la glicina. Observándose un muy buen acuerdo entre las estructuras halladas y las experimentales