

Caio Palatin, Danielle dos Santos Chagas, Gabriel Xavier, Gustavo Beneti

Introdução

Estruturas Metal-Orgânicas:

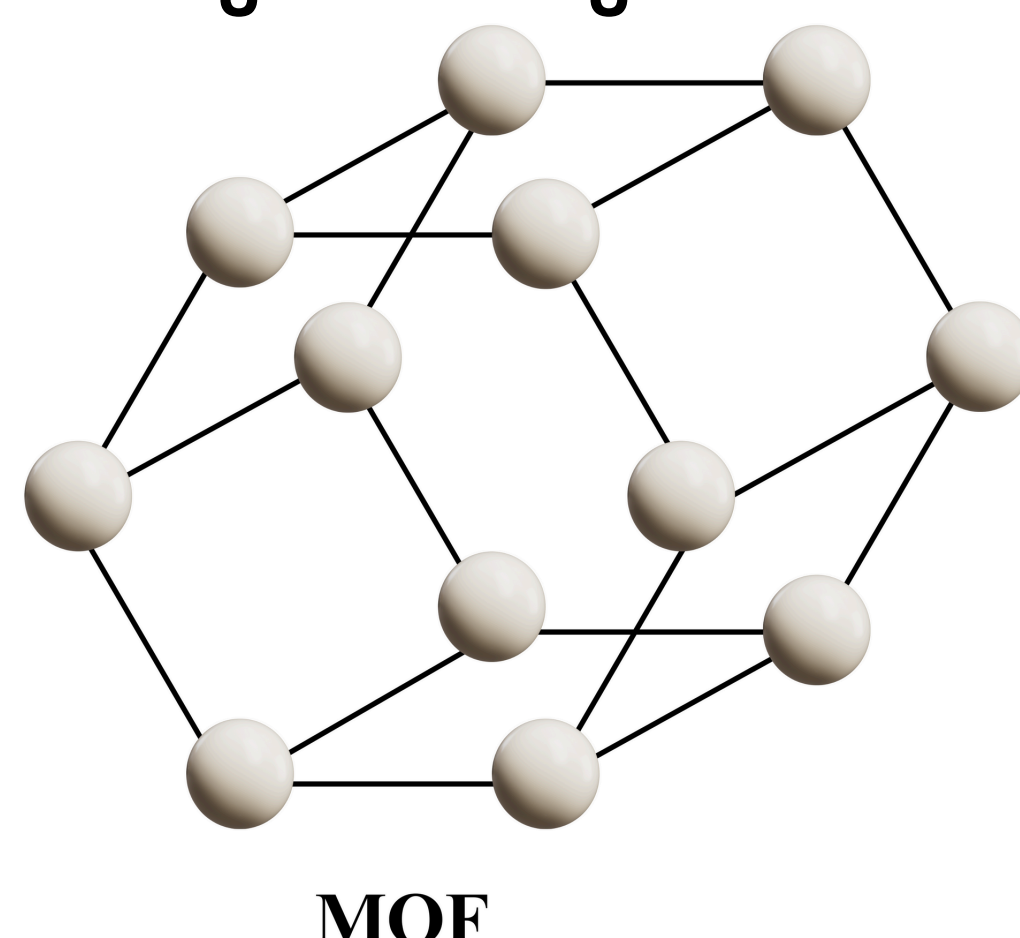
Classes de materiais porosos

Os nós são de metais e as conexões são de ligantes orgânicos

ligações predominantemente covalentes

Íon ou cluster metálico

Ligante orgânico



MOF

A identificação precisa do tamanho de poros em MOFs é crucial para entender e aprimorar suas propriedades.

O ajuste de poros dos MOFs permite uma modificação mais previsível e precisa, resultando em materiais altamente eficientes e seletivos nas áreas de adsorção, catálise, separação e armazenamento.

Imagem 1 - Representação das MOFs

Objetivo

Os objetivos deste trabalho são:

- Utilizar redes neurais para prever o tamanho do poro de um MOF;
- A partir de algoritmos genéticos encontrar a estrutura de uma MOF que possua um tamanho de poro desejado.

Metodologia

Dataset MOFX - DB

20 000 estruturas de MOFs

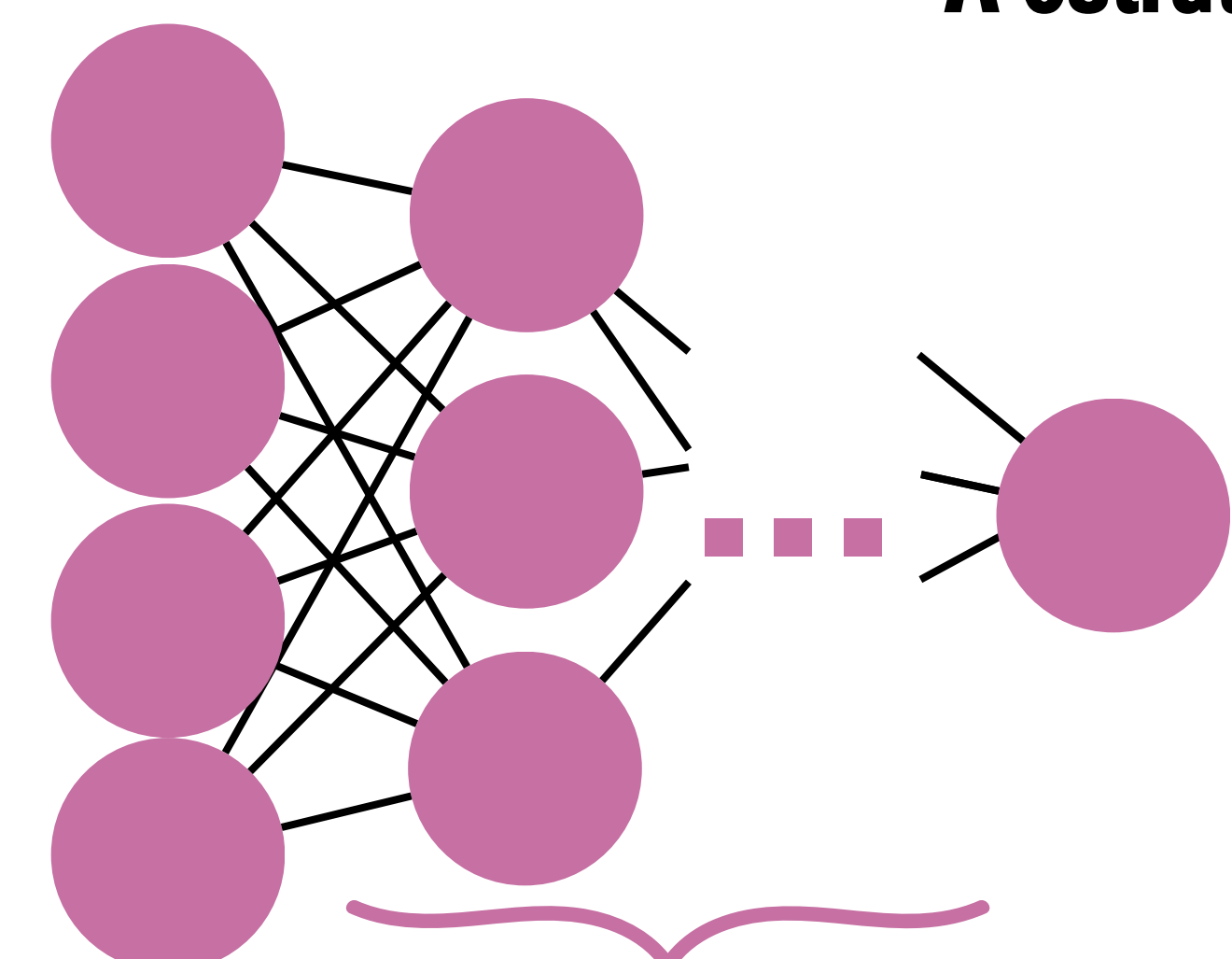
90% treino

10% teste

biblioteca PYTORCH

Valores de void fraction entre 0 e 1

A estrutura da rede neural



4 camadas

Features = spacegroup_num, crystal_system_int, n_symmetry_ops, Zn, H, C, O, F, Cl, Br, N

Camada	Nº neurônios
1	150
2	100
3	80
4	60

Target = Void fraction

500 épocas

Função de ativação - ReLU (rectified linear unit)

Função de perda - erro quadrático médio (MSE Loss)

Modelo da Rede neural

A estrutura do algoritmo genético

Valor máximo de um gene

Quantidade máxima de átomos - 200

Quantidade de genes no indivíduo

Número de elementos - 3

Para tamanho de poro desejado = 0.5:

Inicializar a população

< 500

Selecao - torneio mínimo

Cruzamento-ponto simples

Mutação

Número de gerações

> 500

indivíduo encontrado com tamanho de poro = 0.5

Resultados

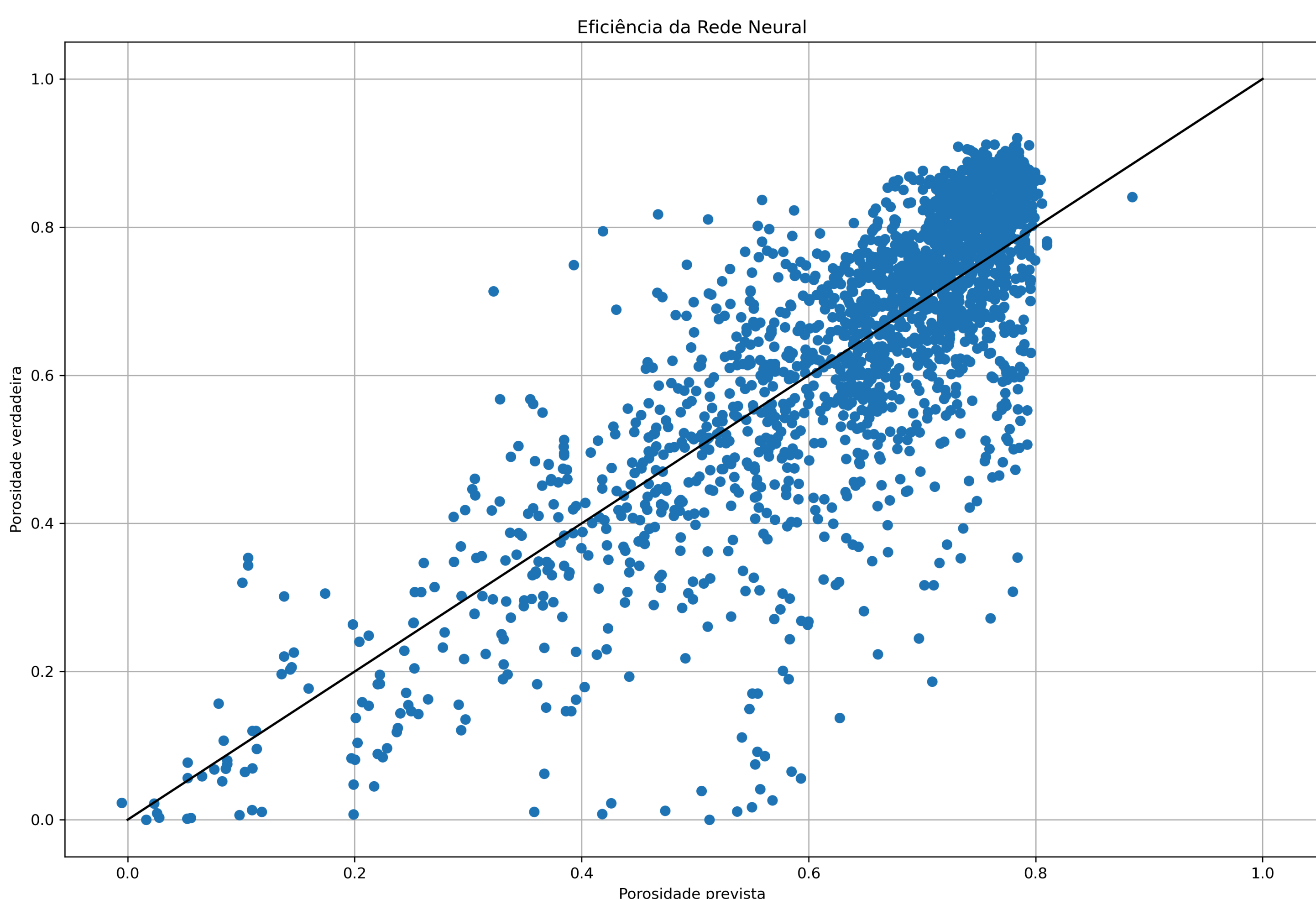


Imagem 2 - Gráfico de análise da eficiência da rede neural. Os eixos representam a porosidade prevista pela porosidade verdadeira.

Valor da função de perda da rede neural = 0.11

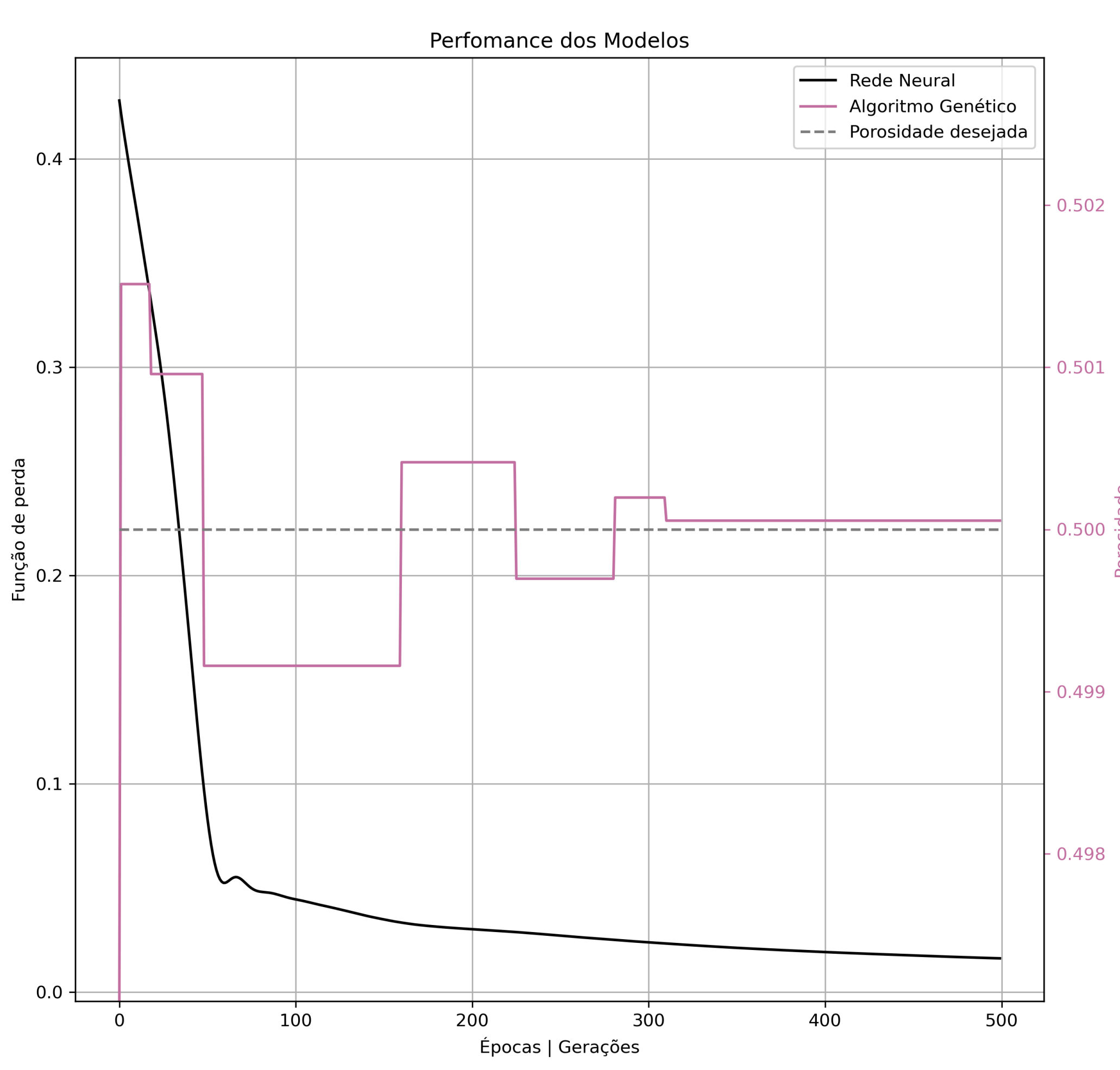
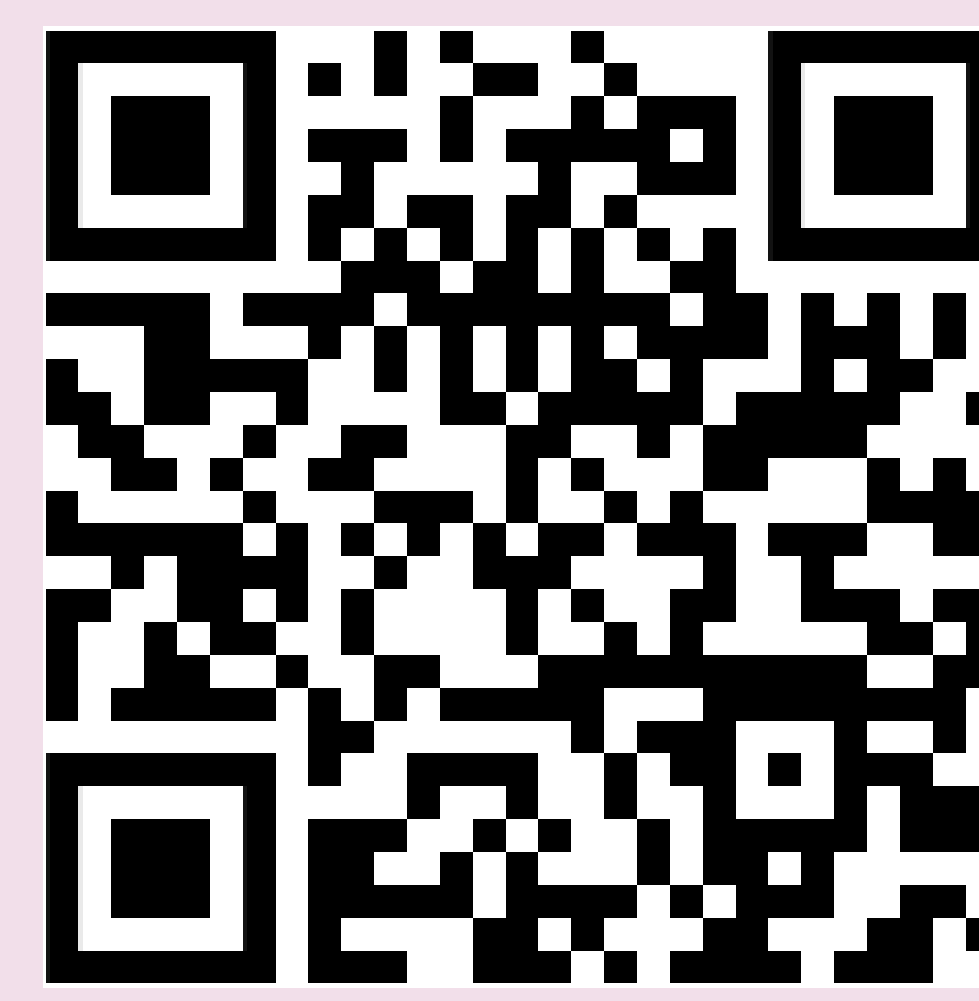


Imagem 3 - Gráfico de performance e comparação entre os modelos de redes neurais e algoritmos genéticos.

Conclusão

Conclui-se que a rede neural convergiu bem na previsão do tamanho do poro de uma MOF, tendo uma baixa função de perda. Os algoritmos genéticos convergiram rapidamente para o tamanho de poro desejado, de forma que, não foram precisas muitas gerações.



Link do repositório com os códigos do projeto no GitHub

[1] Chem. Soc. Rev., 2014,43, 5415-5418

[2] Wang, J., Zhang, Y., Su, Y. et al. Fine pore engineering in a series of isorecticular metal-organic frameworks for efficient C2H2/CO2 separation. Nat Commun 13, 200 (2022)

[3] Zhang, Y. et al. Rational design of microporous MOFs with anionic boron cluster functionality and cooperative dihydrogen binding sites for highly selective capture of acetylene. Angew. Chem. Int. Ed. 59, 17664-17669 (2020)