

# De átomos a sólidos, como diseñar un material cristalino en una computadora

## From atoms to solids, how to design a cristal material in a computer

A H Romero-Castro<sup>1</sup>, G Avendaño-Franco<sup>1</sup>, I Valencia<sup>1,2</sup>, C A Garcia<sup>1,2</sup>, S Singh<sup>1</sup>, O Pavlov<sup>1</sup>, S Botti<sup>3</sup>, M Marques<sup>4</sup>, M Amsler<sup>5</sup> and S Goedecker<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Physics Department, West Virginia, University, USA

<sup>2</sup> CINVESTAV, Unidad Queretaro, Mexico

<sup>3</sup> Institute fuer Festkoerpertheorie und optik, Jena University, Germany

<sup>4</sup> Institute fuer Physik, Halle University, Germany

<sup>5</sup> Physics Department, Universitaet Basseln, Germany.

E-mail: alromero@mail.wvu.edu

**Resumen.** En esta presentación, discutimos las diferentes metodologías usadas para realizar calculo computacional para predicción de materiales. En particular, nosotros enfatizamos los esfuerzos de mi grupo para establecer un método general para ejecutar investigación estructural de materiales de manera automática de materiales combinando termodinámica, cálculos de estructura electrónica con minería de datos, búsquedas de estructuras con métodos metaheurísticas, dinámicos o aleatorios. Esto nos lleva a la base del programa que hemos desarrollado para tal propósito, Pychemia. Nos enfocamos mayoritariamente en los métodos dinámicos usando el método denominado salto entre minimos inicialmente propuesto por Stefan Goedecker. Especialmente nosotros damos los antecedentes del método y discutimos diversas aplicaciones de nuestra implementación. Ellas van desde simples cristales monoatómicos con predicciones novedosas como en bismuto y antimonio a aleaciones binarias, donde nuevas fases y composiciones han sido obtenidas como en el caso de BiSb, LiSi y LiAu. SI el tiempo permite, presentaremos nuestros mas recientes esfuerzos en compuestos AXY y cristales de fluoruros tipo perovskita.

**Abstract.** In this talk, we discuss the different methodologies used to perform computational high throughput calculations. In particular, we spotlight the efforts in my group to develop a general set up to perform automatic structural searches by combining thermodynamics, electronic structure calculations with data mining, metaheuristic, dynamical and random structural searches. This will lead to the basic of the software we have developed for such purpose, Pychemia. We focus mostly on dynamical methods using the so-called Minima Hopping Method initially proposed by Stefan Goedecker. Specially, we will provide the background of the method and discuss several applications of our present implementation. Those will run from simple monoatomic crystals with novel predictions as in Bi and Sb to binary alloys, where new phases and compositions have been obtained as in the case of BiSb LiSi and LiAu. If time allows, we will present our most recent efforts on AXY compounds and fluoride perovskites crystals.