

INÍCIO O CONGRESSO ▾ ANAIS FOTOS PROGRAMAÇÃO ▾ JMM  
INFORMAÇÕES IMPORTANTES ▾ 

PAINEL DO INSCRITO



**10<sup>o</sup>** SIMPÓSIO DE ESTRUTURA  
ELETRÔNICA & DINÂMICA  
MOLECULAR

# SEEDMOL

4 a 8 novembro | 2024

**Seja parte da inovação  
na ciência molecular**

**Reserve seu lugar  
no SEEDMOL**

## BEM-VINDO

[PAINEL DO INSCRITO](#)

[ANAIS ONLINE](#)

**NOVIDADE:** [PROGRAMAÇÃO DETALHADA](#)

[PROGRAMAÇÃO RESUMIDA](#)

É com prazer que o convidamos para participar do 10<sup>o</sup> SeedMol (Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular).

Esta edição do SeedMol é promovida pela Universidade de Brasília, Universidade Estadual de Goiás e Universidade Federal de Goiás. O evento ocorrerá no período de 04-08 de novembro de 2024 [na UEG Câmpus Pirenópolis](#). O evento será presencial.

O Simpósio ocorre a cada dois anos e objetiva oferecer uma visão ampla do desenvolvimento, novos rumos e aplicação da química teórica. Os tópicos vão desde o desenvolvimento e aplicação em química, biologia, química medicinal, bioquímica, farmacologia, estado sólido, catálise, e campos correlatos.

Esperamos com o evento trazer para o Centro-Oeste a discussão em torno desta importante área de química teórica e física atômica e molecular, possibilitando a difusão do conhecimento e o maior intercâmbio. A formação de novos profissionais com uma visão multidisciplinar, com enfoque em metodologias de modelagem e simulação computacional também é um objetivo do evento.

Nesta 10ª Edição do evento esperamos a participação de 150 inscritos entre docentes, professores de ensino médio, pós-doutorandos, alunos de graduação e pós-graduação. Estão confirmadas as presenças de 19 palestrantes, dentre pesquisadores do Brasil, EUA, Europa, e Uruguai. Estes pesquisadores estarão apresentando os seus trabalhos em conferências e minicursos. Também teremos a apresentação de palestras de alunos e pôsteres, enriquecendo o conhecimento dos participantes e o intercâmbio entre os pesquisadores. Além de fortalecer a cooperação dos programas de pós-graduação e parceiros, para melhoria da qualidade da produção científica e tecnológica nacional.

O estado atual em pesquisa e desenvolvimento tem uma forte tendência a usar ferramentas computacionais para otimizar processos e desenvolver novos materiais e rotas de síntese. Física da estrutura eletrônica e química computacional podem disponibilizar uma diminuição nos gastos em diversas tarefas experimentais através de modelagem e simulação, em que a ideia é buscar uma melhor previsão dos resultados. Portanto, as áreas de interesse do simpósio estão listadas abaixo:

- a) Química Quântica computacional e teórica
- b) Biologia Computacional
- c) Bioinformática
- d) Física atômica e molecular
- e) Computação Científica
- f) Química Medicinal
- g) Desenvolvimento de novos materiais
- h) Simulação em catálise heterogênea
- i) Nanomateriais
- j) Modelagem e simulação molecular
- k) biocombustíveis de simulação
- l) Desenvolvimento de métodos e programas em química, física atômica e molecular e bioinformática

## ONDE

**Pirenópolis, GO**

## QUANDO

**4 a 8 de novembro de 2024**

## INSCREVA-SE

16 Sep 2024

### [ÔNIBUS](#)

Ônibus para os participantes do SeedMol

### [LEIA MAIS](#)

07 Aug 2024

### [INSCRIÇÕES EM MINICURSOS](#)

Já estão abertas as inscrições em minicursos.

Acesse o painel do inscrito,

# Optimizing Molecular Descriptors for Reliable Adsorption Energy Prediction on Transition Metal Nanoclusters

Lucas B. Pena<sup>†</sup>, Felipe V. Calderan<sup>‡</sup>, Marcos G. Quiles<sup>‡</sup>, Breno R. L. Galvão<sup>†</sup>, Juarez L. F. Da Silva<sup>¶</sup>

<sup>†</sup>Federal Center for Technological Education of Minas Gerais, 30421-169, Belo Horizonte, MG, Brazil

<sup>‡</sup>Institute of Science and Technology, Federal University of São Paulo, 01109-010, SP, Brazil

<sup>¶</sup>São Carlos Institute of Chemistry, University of São Paulo, PO Box 780, 13560-970, São Carlos, SP, Brazil

e-mail: [lucas.bernardesp205@gmail.com](mailto:lucas.bernardesp205@gmail.com)

The field of nanocatalysis has shown great potential for sustainable energy solutions, such as the conversion of pollutant molecules into valuable chemicals and fuels. Namely, atomically precise metal nanoclusters are promising catalysts for CO<sub>2</sub> reduction, H<sub>2</sub> production, water splitting, and other electrochemical processes.[1] Computational research on these systems often rely on computationally expensive density functional theory (DFT) calculations for analyzing a great diversity of nanocluster structures, catalytic intermediates and adsorption sites.

Due to this problem, a rapid advancement of machine learning for predicting molecular properties has been observed.[2] One critical aspect of this progression is feature engineering, which involves the extraction and selection of molecular descriptors that substantially influence model performance. However, there remains a notable gap in understanding the importance of molecular descriptors in modeling adsorption energies on nanoclusters. This gap is due to constraints in database variability or a lack of comprehensive understanding of widely-used molecular descriptors such as the Coulomb Matrix (CM), Many Body Tensor Representation (MBTR), Atomic Centered Symmetry Functions (ACSF), and Smooth Overlap of Atomic Orbitals (SOAP), which have been recently developed in the DDescribe project as a python package.[3]

In this study, we address the challenge of predicting adsorption energies on nanocluster systems across a wide variety of molecules associated with catalytic processes. By utilizing a meticulously curated database of DFT-calculated adsorption energies, containing over 400,000 samples across diverse molecule-nanocluster combinations, we focus on exploring the significance of the molecular descriptors mentioned earlier. Our systematic analysis and engineering of features from molecular geometries aim to provide interpretability of how these descriptors influence the accuracy and reliability of adsorption energy predictions. This work not only bridges the existing gap in the field but also sets the stage for the development of more efficient machine learning models in nanocatalysis, potentially accelerating the discovery of sustainable energy solutions.

## Acknowledgements:

CNPq, CINE, FAPESP-SHELL project 2017/11631-2, FAPEMIG project APQ-00597-22.

## References:

- [1] Yuan, X.; Zhu, M. Recent Advances in Atomically Precise Metal Nanoclusters for Electrocatalytic Applications. *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2023, 10, 3995–4007. <https://doi.org/10.1039/d3qi00656e>.
- [2] Yao, Z.; Lum, Y.; Johnston, A.; Mejia-Mendoza, L. M.; Zhou, X.; Wen, Y.; Aspuru-Guzik, A.; Sargent, E. H.; Seh, Z. W. Machine Learning for a Sustainable Energy Future. *Nat Rev Mater* 2022, 8 (3), 202–215. <https://doi.org/10.1038/s41578-022-00490-5>.
- [3] Himanen, L.; Jäger, M. O. J.; Morooka, E. V.; Federici Canova, F.; Ranawat, Y. S.; Gao, D. Z.; Rinke, P.; Foster, A. S. Dscribe: Library of Descriptors for Machine Learning in Materials Science. *Computer Physics Communications* 2020, 247, 106949. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.106949>.