

Ciência e Tecnologia

Para o Desenvolvimento
Ambiental, Cultural
e Socioeconômico

Xosé Somoza Medina
(organizador)

VOL IV

 EDITORA
ARTEMIS
2023

Ciência e Tecnologia

Para o Desenvolvimento
Ambiental, Cultural
e Socioeconômico

Xosé Somoza Medina
(organizador)

VOL IV

 EDITORA
ARTEMIS
2023



O conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição Creative Commons Atribuição-Não-Comercial NãoDerivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0). Direitos para esta edição cedidos à Editora Artemis pelos autores. Permitido o download da obra e o compartilhamento, desde que sejam atribuídos créditos aos autores, e sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

A responsabilidade pelo conteúdo dos artigos e seus dados, em sua forma, correção e confiabilidade é exclusiva dos autores. A Editora Artemis, em seu compromisso de manter e aperfeiçoar a qualidade e confiabilidade dos trabalhos que publica, conduz a avaliação cega pelos pares de todos manuscritos publicados, com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

Editora Chefe	Prof. ^a Dr. ^a Antonella Carvalho de Oliveira
Editora Executiva	M. ^a Viviane Carvalho Mocellin
Direção de Arte	M. ^a Bruna Bejarano
Diagramação	Elisangela Abreu
Organizador	Prof. Dr. Xosé Somoza Medina
Imagem da Capa	peacestock/123RF
Bibliotecário	Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422

Conselho Editorial

Prof.^a Dr.^a Ada Esther Portero Ricol, *Universidad Tecnológica de La Habana “José Antonio Echeverría”*, Cuba
Prof. Dr. Adalberto de Paula Paranhos, Universidade Federal de Uberlândia, Brasil
Prof. Dr. Agustín Olmos Cruz, *Universidad Autónoma del Estado de México*, México
Prof.^a Dr.^a Amanda Ramalho de Freitas Brito, Universidade Federal da Paraíba, Brasil
Prof.^a Dr.^a Ana Clara Monteverde, *Universidad de Buenos Aires*, Argentina
Prof.^a Dr.^a Ana Júlia Viamonte, Instituto Superior de Engenharia do Porto (ISEP), Portugal
Prof. Dr. Ángel Mujica Sánchez, *Universidad Nacional del Altiplano*, Peru
Prof.^a Dr.^a Angela Ester Mallmann Centenaro, Universidade do Estado de Mato Grosso, Brasil
Prof.^a Dr.^a Begoña Blandón González, *Universidad de Sevilla*, Espanha
Prof.^a Dr.^a Carmen Pimentel, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil
Prof.^a Dr.^a Catarina Castro, Universidade Nova de Lisboa, Portugal
Prof.^a Dr.^a Cirila Cervera Delgado, *Universidad de Guanajuato*, México
Prof.^a Dr.^a Cláudia Neves, Universidade Aberta de Portugal
Prof.^a Dr.^a Cláudia Padovesi Fonseca, Universidade de Brasília-DF, Brasil
Prof. Dr. Cleberton Correia Santos, Universidade Federal da Grande Dourados, Brasil
Prof. Dr. David García-Martul, *Universidad Rey Juan Carlos de Madrid*, Espanha
Prof.^a Dr.^a Deuzimar Costa Serra, Universidade Estadual do Maranhão, Brasil
Prof.^a Dr.^a Dina Maria Martins Ferreira, Universidade Estadual do Ceará, Brasil
Prof.^a Dr.^a Edith Luévano-Hipólito, *Universidad Autónoma de Nuevo León*, México
Prof.^a Dr.^a Eduarda Maria Rocha Teles de Castro Coelho, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro, Portugal
Prof. Dr. Eduardo Eugênio Spers, Universidade de São Paulo (USP), Brasil
Prof. Dr. Eloi Martins Senhoras, Universidade Federal de Roraima, Brasil
Prof.^a Dr.^a Elvira Laura Hernández Carballido, *Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo*, México



Prof.^ª Dr.^ª Emilas Darlene Carmen Lebus, *Universidad Nacional del Nordeste/ Universidad Tecnológica Nacional, Argentina*
Prof.^ª Dr.^ª Erla Mariela Morales Morgado, *Universidad de Salamanca, Espanha*
Prof. Dr. Ernesto Cristina, *Universidad de la República, Uruguay*
Prof. Dr. Ernesto Ramírez-Briones, *Universidad de Guadalajara, México*
Prof. Dr. Fernando Hitt, *Université du Québec à Montréal, Canadá*
Prof. Dr. Gabriel Díaz Cobos, *Universitat de Barcelona, Espanha*
Prof.^ª Dr.^ª Gabriela Gonçalves, Instituto Superior de Engenharia do Porto (ISEP), Portugal
Prof. Dr. Geoffroy Roger Pointier Malpass, Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Gladys Esther Leoz, *Universidad Nacional de San Luis, Argentina*
Prof.^ª Dr.^ª Glória Beatriz Álvarez, *Universidad de Buenos Aires, Argentina*
Prof. Dr. Gonçalo Poeta Fernandes, Instituto Politécnico da Guarda, Portugal
Prof. Dr. Gustavo Adolfo Juarez, *Universidad Nacional de Catamarca, Argentina*
Prof. Dr. Håkan Karlsson, *University of Gothenburg, Suécia*
Prof.^ª Dr.^ª Iara Lúcia Tescarollo Dias, Universidade São Francisco, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Isabel del Rosario Chiyon Carrasco, *Universidad de Piura, Peru*
Prof.^ª Dr.^ª Isabel Yohena, *Universidad de Buenos Aires, Argentina*
Prof. Dr. Ivan Amaro, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Brasil
Prof. Dr. Iván Ramon Sánchez Soto, *Universidad del Bío-Bío, Chile*
Prof.^ª Dr.^ª Ivânia Maria Carneiro Vieira, Universidade Federal do Amazonas, Brasil
Prof. Me. Javier Antonio Albornoz, *University of Miami and Miami Dade College, Estados Unidos*
Prof. Dr. Jesús Montero Martínez, *Universidad de Castilla - La Mancha, Espanha*
Prof. Dr. João Manuel Pereira Ramalho Serrano, Universidade de Évora, Portugal
Prof. Dr. Joaquim Júlio Almeida Júnior, UniFIMES - Centro Universitário de Mineiros, Brasil
Prof. Dr. Jorge Ernesto Bartolucci, *Universidad Nacional Autónoma de México, México*
Prof. Dr. José Cortez Godínez, Universidad Autónoma de Baja California, México
Prof. Dr. Juan Carlos Cancino Diaz, Instituto Politécnico Nacional, México
Prof. Dr. Juan Carlos Mosquera Feijoo, *Universidad Politécnica de Madrid, Espanha*
Prof. Dr. Juan Diego Parra Valencia, *Instituto Tecnológico Metropolitano de Medellín, Colômbia*
Prof. Dr. Juan Manuel Sánchez-Yáñez, *Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, México*
Prof. Dr. Júlio César Ribeiro, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil
Prof. Dr. Leinig Antonio Perazolli, Universidade Estadual Paulista (UNESP), Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Livia do Carmo, Universidade Federal de Goiás, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Luciane Spanhol Bordignon, Universidade de Passo Fundo, Brasil
Prof. Dr. Luis Fernando González Beltrán, *Universidad Nacional Autónoma de México, México*
Prof. Dr. Luis Vicente Amador Muñoz, *Universidad Pablo de Olavide, Espanha*
Prof.^ª Dr.^ª Macarena Esteban Ibáñez, *Universidad Pablo de Olavide, Espanha*
Prof. Dr. Manuel Ramiro Rodríguez, *Universidad Santiago de Compostela, Espanha*
Prof.^ª Dr.^ª Márcia de Souza Luz Freitas, Universidade Federal de Itajubá, Brasil
Prof. Dr. Marcos Augusto de Lima Nobre, Universidade Estadual Paulista (UNESP), Brasil
Prof. Dr. Marcos Vinicius Meiado, Universidade Federal de Sergipe, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Mar Garrido Román, *Universidad de Granada, Espanha*
Prof.^ª Dr.^ª Margarida Márcia Fernandes Lima, Universidade Federal de Ouro Preto, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª María Alejandra Arecco, *Universidad de Buenos Aires, Argentina*
Prof.^ª Dr.^ª Maria Aparecida José de Oliveira, Universidade Federal da Bahia, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Maria Carmen Pastor, *Universitat Jaume I, Espanha*
Prof.^ª Dr.^ª Maria do Céu Caetano, Universidade Nova de Lisboa, Portugal
Prof.^ª Dr.^ª Maria do Socorro Saraiva Pinheiro, Universidade Federal do Maranhão, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Maria Gracinda Carvalho Teixeira, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil



Prof.^ª Dr.^ª Maria Lúcia Pato, Instituto Politécnico de Viseu, Portugal
Prof.^ª Dr.^ª Maritza González Moreno, *Universidad Tecnológica de La Habana*, Cuba
Prof.^ª Dr.^ª Mauriceia Silva de Paula Vieira, Universidade Federal de Lavras, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Ninfa María Rosas-García, Centro de Biotecnología Genómica-Instituto Politécnico Nacional, México
Prof.^ª Dr.^ª Odara Horta Boscolo, Universidade Federal Fluminense, Brasil
Prof. Dr. Osbaldo Turpo-Gebera, *Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa*, Peru
Prof.^ª Dr.^ª Patrícia Vasconcelos Almeida, Universidade Federal de Lavras, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Paula Arcoverde Cavalcanti, Universidade do Estado da Bahia, Brasil
Prof. Dr. Rodrigo Marques de Almeida Guerra, Universidade Federal do Pará, Brasil
Prof. Dr. Saulo Cerqueira de Aguiar Soares, Universidade Federal do Piauí, Brasil
Prof. Dr. Sergio Bitencourt Araújo Barros, Universidade Federal do Piauí, Brasil
Prof. Dr. Sérgio Luiz do Amaral Moretti, Universidade Federal de Uberlândia, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Silvia Inés del Valle Navarro, *Universidad Nacional de Catamarca*, Argentina
Prof.^ª Dr.^ª Solange Kazumi Sakata, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN)- USP, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Stanislava Kashtanova, *Saint Petersburg State University*, Russia
Prof.^ª Dr.^ª Teresa Cardoso, Universidade Aberta de Portugal
Prof.^ª Dr.^ª Teresa Monteiro Seixas, Universidade do Porto, Portugal
Prof. Dr. Valter Machado da Fonseca, Universidade Federal de Viçosa, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Vanessa Bordin Viera, Universidade Federal de Campina Grande, Brasil
Prof.^ª Dr.^ª Vera Lúcia Vasilévski dos Santos Araújo, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Brasil
Prof. Dr. Wilson Noé Garcés Aguilar, *Corporación Universitaria Autónoma del Cauca*, Colômbia
Prof. Dr. Xosé Somoza Medina, *Universidad de León*, Espanha

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(eDOC BRASIL, Belo Horizonte/MG)

C569 Ciência e tecnologia para o desenvolvimento ambiental, cultural e socioeconômico IV [livro eletrônico] / Organizador Xosé Somoza Medina. – Curitiba, PR: Artemis, 2023.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

Edição bilíngue

ISBN 978-65-81701-11-6

DOI 10.37572/EdArt_301123116

1. Desenvolvimento sustentável. 2. Tecnologia – Aspectos ambientais. I. Somoza Medina, Xosé.

CDD 363.7

Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422



PRÓLOGO

En este nuevo libro de la serie “Ciencia e Tecnología para o desenvolvimiento ambiental, cultural e socioeconómico” se han seleccionado diecisiete trabajos de gran calidad académica y capacidad de transferencia a la sociedad. Este último aspecto debe ser subrayado y puesto en valor. Un gran número de investigaciones publicadas en revistas de elevado nivel científico carecen de este impacto en la sociedad al desarrollar debates teóricos muy específicos que no tienen una traslación a la rutina diaria fuera de los laboratorios y aulas universitarias. En cambio, en todos los artículos que componen esta monografía se traslada de forma explícita la voluntad de las autoras y los autores de que sus investigaciones tengan un impacto real en la sociedad. Esta manera de actuar es una forma que tenemos las personas que nos dedicamos a investigar de devolver a la sociedad una parte de lo que se nos ha dado para poder dedicarnos profesionalmente a producir ciencia y tecnología.

Como en ocasiones anteriores, los trabajos publicados en este volumen se dividen en dos grandes apartados: Ciencia, con diez aportaciones, y Tecnología, con siete. En el primer apartado, Ciencia, sobresalen una serie de conceptos que muestran esa voluntad de transferencia a la sociedad, son innovación, gestión del conocimiento, y digitalización, aplicables principalmente a pequeñas y medianas empresas. El primer trabajo desarrolla el modelo de conocimiento e innovación sostenible en las PYMES, mientras que el siguiente capítulo estudia las condiciones necesarias para que surja la innovación y el tercero los sistemas de selección de personal en las PYMES a través del análisis de puestos. El cuarto capítulo analiza la innovación a través de un estudio de caso, concretamente el de una empresa familiar del sector de la construcción en México; el quinto traslada un diagnóstico de la transformación digital en las PYMES realizado en Bogotá y el sexto muestra como las características culturales afectan la planeación estratégica de las MIPYMES mexicanas. El séptimo trabajo estudia la capacitación digital de la demanda de turismo cultural en Michoacán. Los dos capítulos siguientes muestran nuevos modelos de gestión en las universidades, trasladables a las empresas, y el último trabajo desarrolla aspectos sobre la legislación mexicana en materia de protección de datos.

El segundo bloque de esta monografía, Tecnología, agrupa siete investigaciones aplicadas desde los campos de la ingeniería agrícola, geológica, o química. Los dos primeros trabajos son de agronomía, con investigaciones empíricas sobre residuos cítricos y maíz azul. El tercer trabajo analiza riesgos ambientales geológicos en la cuenca Inambari, en Perú y el cuarto trabajo las consecuencias de los incendios forestales en el Estado de Jalisco, México. Los tres capítulos siguientes desarrollan investigaciones de química aplicada, orientada a la electrólisis, las nanoestructuras o la metalurgia de las superaleaciones, que es el trabajo que cierra este volumen de “Ciencia e Tecnología para o desenvolvimiento ambiental, cultural e socioeconómico”.

Xosé Somoza Medina
Universidad de León, España

SUMÁRIO

CIENCIA

CAPÍTULO 1..... 1

GESTIÓN DE CONOCIMIENTO E INNOVACIÓN SOSTENIBLE COMO BASE DEL ECOSISTEMA QUE FORTALECE LAS PEQUEÑAS Y MEDIANAS EMPRESAS

Ana Judith Paredes-Chacín

Fanery Andrea Hoyos-Giraldo

 https://doi.org/10.37572/EdArt_3011231161

CAPÍTULO 2..... 26

¿DÓNDE NACE LA INNOVACIÓN? PERSPECTIVAS TEÓRICAS DESDE LAS CAPACIDADES DE LA EMPRESA

Moisés Librado-González

Ramón Inzunza-Acosta

Víctor Santiago-Sarmiento

 https://doi.org/10.37572/EdArt_3011231162

CAPÍTULO 3..... 38

INVESTIGACIÓN DE ANÁLISIS DE PUESTOS EN LA PEQUEÑA Y MEDIANA EMPRESAS (PYMES)

Giuseppe Francisco Falcone Treviño

Karina Ornelas Garza

Zaida Leticia Tinajero Mallozzi

Joel Luis Jiménez Galán

 https://doi.org/10.37572/EdArt_3011231163

CAPÍTULO 4..... 79

GESTIÓN DEL CONOCIMIENTO EN PYMES DEL SECTOR CONSTRUCCIÓN: ESTUDIO DE CASO

Román Alberto Quijano García

Roger Manuel Patrón Cortés

Giselle Guillermo Chuc

Fidel Ramón Alcocer Martínez

 https://doi.org/10.37572/EdArt_3011231164

CAPÍTULO 5..... 89

DIAGNÓSTICO DE LA TRANSFORMACIÓN DIGITAL EN PYMES

Zulma Julieth Avellaneda Avellaneda

Iván Fernando Suárez Lozano

Nairo Yovany Rodríguez Cabrera

 https://doi.org/10.37572/EdArt_3011231165

CAPÍTULO 6..... 103

APROXIMACIÓN TEÓRICA AL CONCEPTO DE EVASIÓN A LA INCERTIDUMBRE Y ORIENTACIÓN A LARGO PLAZO EN LA PLANEACIÓN ESTRATÉGICA DE LAS MIPYMES MEXICANAS

Carlos Alberto Pérez Canul


Charlotte Monserrat Llanes Chiquini

Roger Manuel Patrón Cortés

Giselle Guillermo Chuc

Diana Concepción Mex Álvarez

Thania Tuyub Ovalle

 https://doi.org/10.37572/EdArt_3011231166

CAPÍTULO 7..... 113

LA IMPORTANCIA DE LA FORMACIÓN DE PÚBLICOS PARA EL TURISMO CULTURAL EN LA ERA DIGITAL, EL CASO DE MICHOACÁN

Omar Becerra Moreno

Tzitzitzi Erandi Becerra Moreno

Zoe Becerra Santacruz

 https://doi.org/10.37572/EdArt_3011231167

CAPÍTULO 8..... 126

LOS ECOSISTEMAS DE INVESTIGACIÓN EN LAS UNIVERSIDADES

José Ángel Meneses Jiménez

Pedro Julián Ormeño Carmona

 https://doi.org/10.37572/EdArt_3011231168

CAPÍTULO 9..... 133

DISEÑO DE UN SISTEMA DE GESTIÓN DE CONVENIOS

Diana Concepción Mex Alvarez

Luz María Hernández Cruz

Charlotte Monserrat Llanes Chiquini

Carlos Alberto Pérez Canul
Roger Manuel Patrón Cortés
Thania del Carmen Tuyub Ovalle

 https://doi.org/10.37572/EdArt_3011231169

CAPÍTULO 10.....143

LA LEGISLAZIONE MESSICANA IN MATERIA DI PROTEZIONE DI DATI PERSONALI
SODDISFA IL CRITERIO D'ADEGUATEZZA EUROPEO?

Eduardo Orozco Martínez

 https://doi.org/10.37572/EdArt_30112311610

TECNOLOGÍA

CAPÍTULO 11.....159

TRATAMIENTO DE RESIDUOS CÍTRICOS GENERADOS EN LA ZONA CENTRO-
NORTE DE VERACRUZ PARA LA PRODUCCIÓN DE COMPOST

Yovani López González
Neira Sánchez Zárate
Heidi Anabel Jácome Sánchez
Luis Alfredo Hernández Vázquez
Edson Aldair Sánchez Ramos

 https://doi.org/10.37572/EdArt_30112311611

CAPÍTULO 12..... 164

CUANTIFICACIÓN DE ANTOCIANINAS EN MAÍZ AZUL

Germán Fernando Gutiérrez-Hernández
José Luis Arellano-Vázquez
Luis Fernando Ceja-Torres
Estela Flores-Gómez
Patricia Vázquez-Lozano

 https://doi.org/10.37572/EdArt_30112311612

CAPÍTULO 13.....170

PELIGRO GEOLÓGICO, SUSCEPTIBILIDAD Y RIESGO DE DESASTRE EN LA CUENCA
INAMBARI

Newton Víctor Machaca Cusilayme
José Mamani
Sofía Benavente

Alexandre Campane Vidal

 https://doi.org/10.37572/EdArt_30112311613

CAPÍTULO 14.....175

ESTIMACIÓN DE GASES EFECTO INVERNADERO PRODUCIDOS POR DIFERENTES CLASES DE COMBUSTIBLES FORESTALES EN EL ESTADO DE JALISCO

José German Flores-Garnica
Ana Graciela Flores-Rodríguez
Esteban Gottfried-Burguett

 https://doi.org/10.37572/EdArt_30112311614

CAPÍTULO 15.....185

OXYGEN REDUCTION REACTION ON FENSEC MATERIALS, THEIR ELECTROLYTIC ACTIVITY IN ACID MEDIA

Ricardo González-Cruz
Idalia Rangel-Salas
Ana B. Soto-Guzmán
Ricardo Manríquez
Omar Solorza-Feria

 https://doi.org/10.37572/EdArt_30112311615

CAPÍTULO 16.....197

NUEVAS NANOESTRUCTURAS DE MÍNIMO POTENCIAL DE LENNARD JONES Y MORSE

Carlos Barrón Romero

 https://doi.org/10.37572/EdArt_30112311616

CAPÍTULO 17.....215

ESTUDIO DE UNA SUPERALEACIÓN 718 SOLDADA CON EL PROCESO DE SOLDADURA GTAW DESDE UNA PERSPECTIVA TÉRMICA

Maria de Lourdes Hernández Rodríguez
Ma. de Jesús Soria Aguilar
Francisco Fernando Curiel López
Jorge Leobardo Acevedo Dávila
Ana Cecilia Palos Zuñiga

 https://doi.org/10.37572/EdArt_30112311617

SOBRE O ORGANIZADOR..... 227

ÍNDICE REMISSIVO228

NUEVAS NANOESTRUCTURAS DE MÍNIMO POTENCIAL DE LENNARD JONES Y MORSE

Data de submissão: 14/11/2023

Data de aceite: 21/11/2023

Carlos Barrón Romero

Universidad Autónoma Metropolitana

Unidad Azcapotzalco

CDMX, México

ORCID: 0000-0003-2435-6645

RESUMEN: El diseño molecular y el estudio de las nanoestructuras por Química Computacional, por ejemplo, bajo un mínimo potencial de tipo Van Der Waals, como lo son los potenciales de Morse y Lennard Jones es una forma de modelar y predecir nuevas estructuras de nano moléculas de partículas complementaria a las costosas investigaciones experimentales. Este trabajo presenta novedosas nanoestructuras estables a pequeños cambios de potencial, denominados nano vehículos que posiblemente se pueden crear experimentalmente. Los nano vehículos predichos son estables por ser mínimo potencial y consisten en una envoltura de capas de partículas capaces de contener en su centro de masa a distintos, centrados y separados núcleos de pocas partículas. La estabilidad a variaciones de potencial se comprueba mediante una novedosa comparación entre potenciales de Morse similares al potencial de Lennard Jones. Los resultados muestran las novedosas formas

geométricas y coloraciones que se obtienen entre distintas capas de envolturas y distintos tipos de núcleos.

PALABRAS-CLAVE: Química de materiales. Nanoquímica. Dinámica molecular.

NEW NANOSTRUCTURES OF MINIMUM POTENTIAL OF LENNARD JONES AND MORSE

ABSTRACT: Molecular design and the study of nanostructures by Computational Chemistry, for example, under a minimal Van Der Waals-type potential, such as the Morse and Lennard Jones potentials, is a way of modeling and predicting new structures of nano molecules of complementary particles. to costly experimental research. This work presents novel nanostructures stable to small potential changes, called nano vehicles that can possibly be created experimentally. The predicted nano vehicles are stable because they are potential minimum and consist of an envelope of layers of particles capable of containing different, centered, and separated cores of few particles in their center of mass. Stability to potential variations is verified by a novel comparison between Morse potentials like the Lennard Jones potential. The results show the novel geometric shapes and colorations that are obtained between different layers of envelopes and different types of cores.

KEYWORDS: Materials Chemistry. Nanochemistry. Molecular Dynamics.

1 INTRODUCCIÓN

De los potenciales de Morse y Lennard Jones y sus clústeres de mínimo potencial existe una amplia literatura (Hartke, 2002; Morse, 1929; Hoare y McInnes, 1983; Northby, 1987; Gómez y Barrón, 1991; Maier et al., 1992; Maranas y Floudas, 1994; Deaven y Ho, 1995; Barrón et al., 1997; Leary, 1997; Wales y Doye, 1997; Doye, 1998; Doye, et al. 1999; Wolf & Landman, 1998; Leary, 1999; Hartke, 1999; Barrón et al., 1999; Wille, 1999; Solov'yov et al., 2003; Jiang et al., 2003; Huang et al., 2002; Cai et al., 2002a; Cai et al., 2002b; Jiang et al., 2003; Shao et al., 2004a; Xiang et al., 2004b; Xiang et al., 2004a; Shao et al., 2004b; Barrón, 2005; Shao et al., 2005; Doye, 2006; Dittner & Hartke, 2016; Barrón, 2022a, 2022b). Se ha demostrado que estos sencillos potenciales tienen un gran poder predictivo para ayudar a las investigaciones experimentales en la creación de nuevas formas geométricas de nanomateriales. Los clústeres de los potenciales de Lennard Jones y Morse han sido usado como modelos predictivos (ver Cambridge Cluster Database (CCD), Wales et al., 1995). Por ejemplo, los núcleos icosaédricos con ausencia de partícula central (aquí se nombra N12IC) se encuentran en nanomateriales de oro (Saho, et al., 2004b), los clústeres de sodio que coinciden con la secuencia de números mágicos (Haberland et al., 2005), diseño de cuasi cristales icosaédricos (Noya et al., 2021).

2 METODOLOGIA

La experimentación numérica en este trabajo utiliza dos funciones de potencial de Van Der Waals que cumplen las propiedades de un pozo de potencial (Pardalos et al., 1994):

$$LJ(d) = \frac{1}{d^{12}} - \frac{2}{d^6} \quad y$$

$$\text{Morse}(\delta, d) = e^{\delta(1-d)}(e^{\delta(1-d)} - 2)$$

donde d es la distancia entre partículas. La selección del parámetro de Morse es para tener dos aproximaciones cercanas al potencial de Lennard Jones, $MR(d)=\text{Morse}(6, d)$ y $MO(d) = \text{Morse}(5.3554, d)$ (ver Barrón, 2022b).

Figura 1. Potenciales de MR (rojo), LJ (verde) y MO (azul).

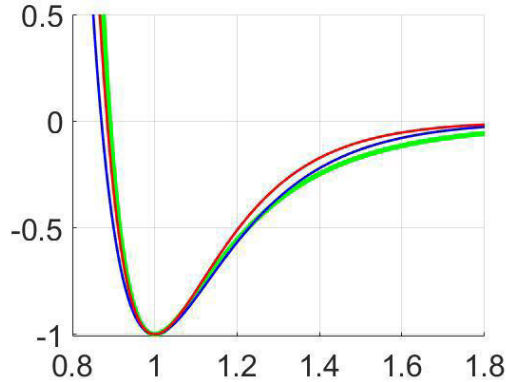
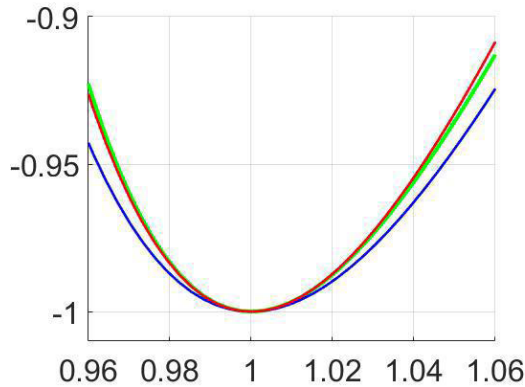


Figura 2. Valle de atracción de los potenciales de MR (rojo, angosto), LJ (verde, referencia) y MO (azul, ancho).



Por medio de un desarrollo de Taylor de segundo orden alrededor de la distancia óptima 1, las funciones de potencial de LJ, MR y MO satisfacen:

$$LJ(1+h) \approx -1 + 36h^2, MR(1+h) \approx -1 + 36h^2 \text{ y } MO(1+h) \approx -1 + \frac{57.361}{2}h^2$$

donde h es un valor pequeño. Tal propiedad indica que las partículas están fuertemente ligadas alrededor de la distancia óptima 1 y junto con la baja fuerza de las interacciones en la zona asintótica ($d > 1.4$) se predice la existencia de grupos de partículas a distancia 1 y junto con la zona asintótica ($d \in [1.4, \infty)$), se pueden crear envolturas, o sea son capas convexas con centro vacío. En este trabajo se crearon varios tipos de envolturas de al menos dos niveles, o sea sobre dos radios al centro de masa distintos y cercanos, con centro vacío o capaces de mantener un pequeño núcleo o cúmulo en su interior.

La determinación de que los clústeres forman un nano vehículo estable es cuando se cumplen las condiciones (estabilidad con variación del potencial): 1)

Corresponden con mínimos locales de potencial y 2) No cambian su estructura con las variaciones de los potenciales de LJ, MR y MO (ver figura 7). Para la minimización local se usa el algoritmo de memoria limitada (L-BFGS-B) de la distribución libre en lenguaje FORTRAN que ofrecen (Morales y Nocedal, 2011). El inciso 1) se refiere a mantener las condiciones experimentales, como por ejemplo la refrigeración y la presión constantes de forma que la función de potencial permanece constante durante la refrigeración para buscar un estado de mínimo potencial (Haberland et al., 2005), i.e., la minimización sin cambiar la función de potencial. Mientras que el inciso 2) se refiere al cambio de las condiciones experimentales, por ejemplo, para transporte bajo condiciones distintas de experimentación, presión temperatura de su proceso de refrigeración correspondiente para verificar que la estructura un clúster de mínimo potencial no cambie por la variación de la función de potencial, i.e., corresponde a minimizar cambiando de una función de potencial a otra función de potencial (ver figura 7). Este punto es muy relevante para el estudio de la estabilidad de nano estructuras, bajo cambios potenciales similares.

3 DISEÑO DE LOS EXPERIMENTOS

Las simulaciones para determinar nano vehículos en este trabajo se basan en una selección de núcleos y de envolturas construidas a partir de latices.

3.1 NÚCLEOS

Los núcleos seleccionados son una partícula central, el tetraedro minimizado (oLJ4_N4T es el mayor clúster mínimo global por condiciones de optimalidad clásicas de primer y segundo orden), un cubo minimizado, (N8CB), el icosaedro con partícula central (oLJ13_n13IC, ver Barrón, 2022a), prisma pentagonal con tapas de pirámides pentagonales (N13IR) , el balón pentagonal de 20 partículas es un mínimo local (N20BalonP), la estrella pentagonal de 32 partículas es un mínimo local (N32EstrellaP), el octaedro truncado cúbico centrado en las caras de 38 partículas (Doye et al. 1999) es un óptimo global para LJ y MO, para MR es un clúster mínimo local (aquí lo denominamos oLJ38_N6OC) y el posible clúster mínimo global de núcleo bipirámide pentagonal (lo llamamos, oLJ39_N7PBP). La figura 3 muestra los núcleos. La figura 3. I. muestra el posible clúster mínimo global de 39 partículas que se ha coloreado con esferas de la mitad del radio mínimo de interacción, tal coloración desprende la propiedad de que este núcleo es orientable, distingue dos direcciones, superior e inferior en la orientación que se muestra.

Figura 3. Núcleos **A.** oLJ4 (oLJ4_N4T), **B.** N8CB, **C.** oLJ13 (oLJ13_N13IC), **D.** N13IR, **E.** N20BaIP (N20 Balón Pentagonal), **F.** N32EstP (N32 Estrella Pentagonal), **G.** oLJ38 (oLJ38_N6OC), **H.** oLJ39 (oLJ39_N7PBP), **I.** OLj39_N7PBP con esferas de radio mínimo de interacción para orientación.

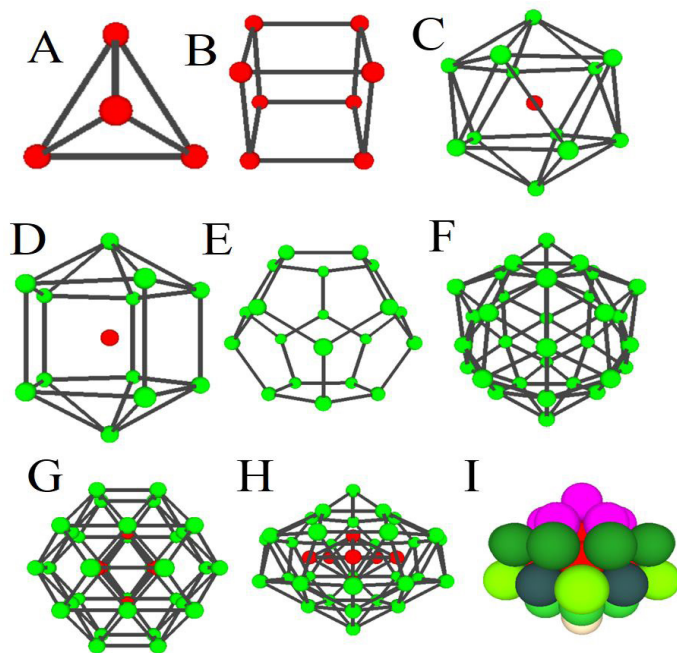
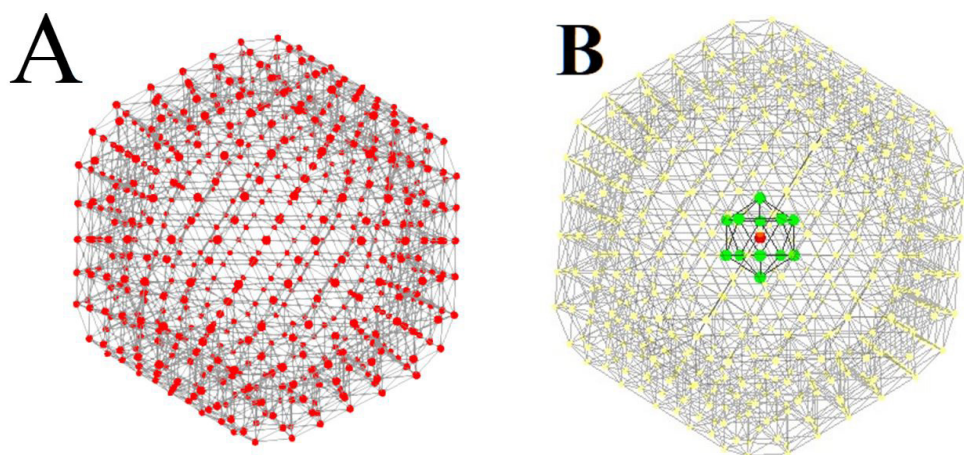


Figura 4. **A.** Envoltura redondeada de 614 partículas de la lattice IC, **B.** Nano-vehículo de 627 partículas con oLJ13_N13IC al centro.

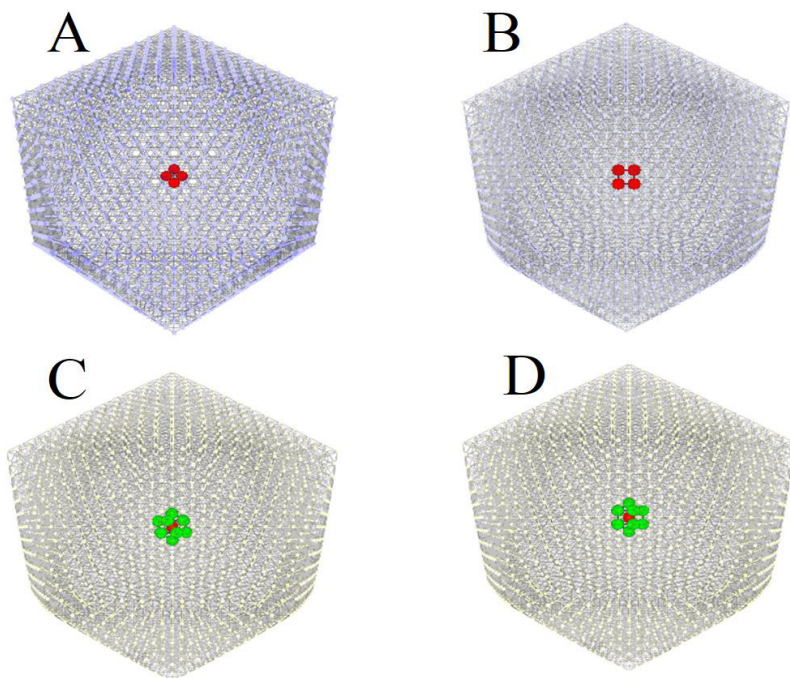


3.2 ENVOLTURAS

Regiones convexas de las latices, redes de tipo cristalinas de distancia mínima optimizada. La figura 9 muestra las envolturas de la lattice IC de 614, 2654 y 3656 partículas

que se usan en este trabajo. Las envolturas son capas de la latices IC (que se construye a partir de un icosaedro con una partícula de núcleo, Fig. 3.C), IR (en este caso se parte del prisma pentagonal con pirámides pentagonales de tapas, Fig. 3. D), N4T (la capa cero es el tetraedro minimizado oLJ4_N4T), N6OC (se parte del octaedro minimizado) y N7PBP (se parte de la bipirámide pentagonal minimizada). En este trabajo todos los cúmulos reportados son minimizados por el algoritmo L-BFGS-B. O sea, se construyen geoméricamente como redes cristalinas de Bravais y seleccionando un gran numero a partir de un centro apropiado se minimiza. Posteriormente se procede a quitar las capas interiores y a seleccionar capas exteriores, que se pueden redondear, i.e., se seleccionan las partículas a partir del centro por medio de una esfera de un radio apropiado (ver figura 4.A.) o se escalaron.

Figura 5. **A.** Nano vehículo 2658, oLJ4 en envoltura IC de 2654 partículas, **B.** Nano vehículo 3664, N8CB en envoltura IC de 3656 partículas, **C.** Nano vehículo 2667, oLJ13 en envoltura IC de 2654 partículas, **D.** Nano vehículo 3669, N13IR en envoltura IC de 3656 partículas.



3.3 COLORACIÓN DE LOS CLÚSTERES DE LJ Y MORSE DE 2 A 55 PARTÍCULAS

Las figuras 10 y 11 presentan los posibles clústeres de mínimo potencial de MR. LJ y MO con una visión nueva para los primeros 55 casos. En nuestro conocimiento estas nuevas representaciones de los clústeres muestran por primera vez, cuantas esferas

de radio similar se requieren para los clústeres de mínimo potencial. También muestran las diferencias geométricas debido a la forma de agruparse en función de núcleo como semilla geométrica. Las esferas de colores, donde el color corresponde a la mitad de la mínima longitud de los vecinos de un vértice, es un valor que indica cuantas esferas diferentes se tienen en el posible clúster de mínimo potencial global. Por ejemplo, los casos de 2 a 7 para los tres potenciales, solo requieren un tipo de esfera, mientras para $n=8$, los clústeres de MR, LJ y MO requieren 4 tipos de esferas de color, i.e., cuatro esferas de radio distinto. Además, los colores de los tres clústeres indican que en cada caso las esferas son de diferentes radios. Esta forma de colorear a los clústeres está relacionada con el famoso problema de *Kissing sphere problem*.

4 RESULTADOS Y DISCUSION

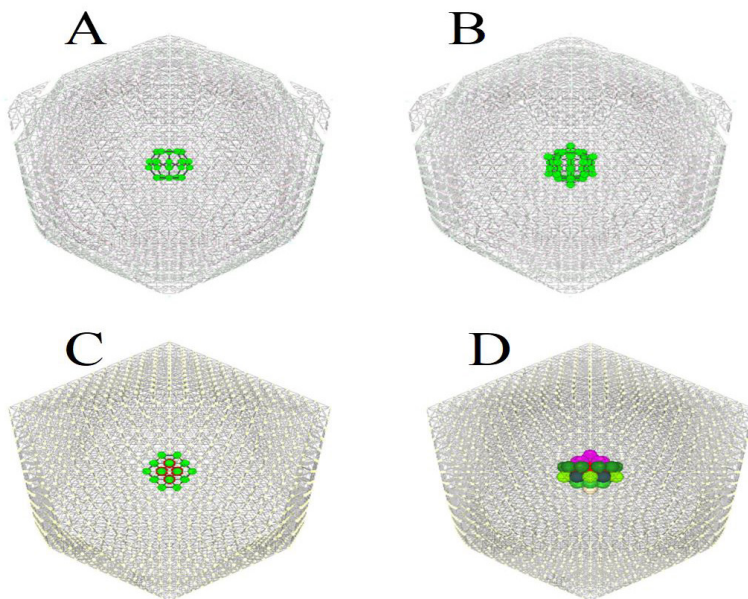
Se tienen experimentos con una variedad de envolturas, para este trabajo se presentan las que se derivan de la lattice IC.

Las tablas de resultados muestran el valor del potencial en la primera fila de cada núcleo cuando fue posible construirlo fijando el potencial, i.e., las condiciones de experimentación son fijas y corresponden con alguno de los potenciales LJ, MO o MR. Debajo del valor del potencial en cada columna se indica el paso de un potencial a otro, i.e., partiendo de una estructura mínima local de las condiciones de un potencial se cambia a las condiciones de laboratorio de otro potencial y se espera que se estabilice y no se altere la estructura inicial (el éxito se indica con \checkmark y el fracaso con X). Para el núcleo N13IR se indica fracaso cuando este cambia a oLJ13 (se indica con X oLJ13), en los otros caso X, el fracaso significa que el núcleo perdió su forma. Cuando no cambia la estructura con Los cambios de potencial indicados en la figura 7, el nano vehículo se considera estable, en otro caso es inestable.

La tabla 1. muestra los resultados de la envoltura de la figura 4. A, que claramente es insuficiente para obtener nano vehículos estables para algunos núcleos grandes.

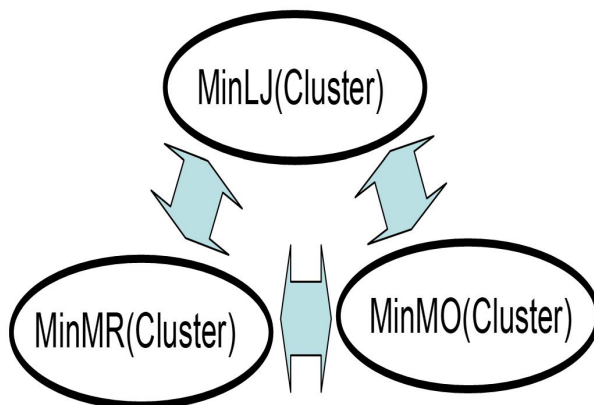
Las figuras de los resultados solo muestran los núcleos y las primeras envolturas que permiten crear nano vehículos estables, i.e., se omiten los casos inestables.

Figura 6. **A.** Nano vehículo 3676, N20BaIP en envoltura IC de 3656 partículas, **B.** Nano vehículo 3688, N32EstP en envoltura IC de 3656 partículas, **C.** Nano vehículo 652, oLJ38 en envoltura IC de 614 partículas, **D.** Nano vehículo 3695, oLJ39 orientable en envoltura IC de 3656 partículas.



La tabla 2. corresponde con la envoltura IC de las capas 11 y 12 de una región IC centrada en un icosaedro con partícula central, la partícula central es la capa cero. Se construyó la envoltura de 3656 partículas de las capas 10, 11 y 12 de IC y la tabla 3 muestra resultados similares a los de la tabla 2. De los núcleos propuestos en la figura 3, los núcleos N13IR, N20BaIP y N32EstP son inestables bajo cambios de potencial porque su estructura rota o colapsa porque las ligas entre pares de partículas no la tienen rigidez del tetraedro o del icosaedro.

Figura 7. Estabilidad a los cambios de potencial significa minimizar un clúster con los diferentes potenciales sin que cambie su forma.



El último experimento que se presenta consiste en un diseño con un núcleo diferente a los seleccionados, se trata de un rombo octaedro de 24 partículas. La figura 8 muestra el estable nano vehículo de 3459 partículas que se estructuró con un rombo octaedro de 24 partículas con partícula central, su envoltura proviene de la latice IC es redonda y se expandió su radio de 10.55 a 11.9 para lograr estabilidad, los potenciales mínimos son LJ = -8259.2572, MO= -7286.5215, MR= -6230.2296.

Figura 8. **A.** Rombo octaedro de 24 partículas con partícula central, **B.** Nano vehículo 3459, con un rombo octaedro con partícula central de 25 de partículas como núcleo dentro de una envoltura especial (redondeada y escalada al radio 11.9) de la latice IC de 3434 partículas.

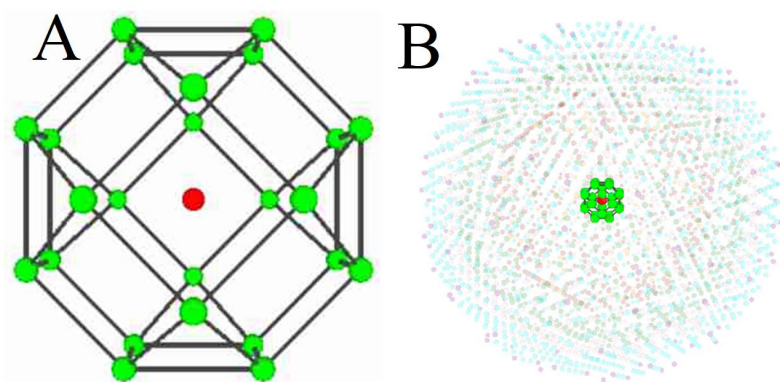
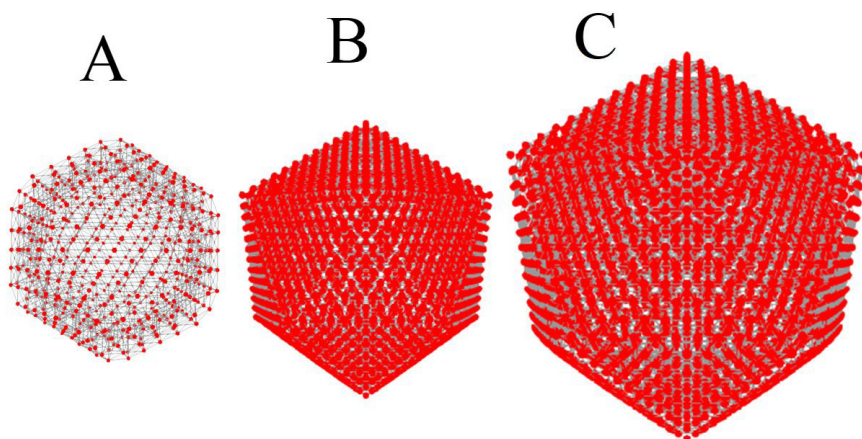


Figura 9. Envolturas de la latice IC de A) 614, B) 2654 y C) 3656 partículas.



5 CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

Las simulaciones numéricas abren un camino para la creación de este tipo de estructuras de forma experimental.

Incluimos los primeros casos de una nueva coloración de los clústeres de LJ y Morse en las figuras 10 y 11. Los casos de los números mágicos 13 y 55 son notables. Para $n=13$ los tres potenciales muestran que se requiere un solo tipo de esfera, su número de colores es 1, o sea se tiene una solución del famoso problema “*Kissing sphere problem*” que da como resultado 12 besos, ya que las de las 13 esferas de igual radio, 12 tocan a la esfera central. Para $n=55$ se requieren tres colores, i.e., tres esferas de distinto radio empacadas en forma icosaédrica, donde los radios de los clústeres de MR y LJ son los mismos, pero lo de MO son diferentes. Las formas de los clústeres se mantienen similares de 2 a 36 partículas. Para $n=37$ las coloraciones de los clústeres son diferentes, aunque mantienen el mismo tipo de semilla de núcleo: N7PBP. El caso del permutahedron arquimediano, $n=38$, muestra esta configuración derivada de la semilla núcleo N6OC para los potenciales MR y LJ, mientras que para el potencial MO le corresponde una geometría derivada de la semilla núcleo N7PBP.

Lograr estabilidad para la minimización y la variación de potenciales se muestra en la tabla 3 y en el diseño del nano vehículo 3459 de la figura 6. Es muy probable que para el diseño de los núcleos de los nano vehículos solo se requieran mantener fijas y controladas las condiciones experimentales (minimización local bajo una función de potencial dada). El núcleo N13IR mostró inestabilidad dentro de las envolturas, cuando en la minimización se cambia la función de potencial, este cambia su estructura a la del núcleo oJL13_N13IC (El cual recientemente paso de putativo a ser el mínimo global para 13 partículas para el potencial de LJ, Barrón, 2022a). Los núcleos N20BalP (N20 Balón Pentagonal) y 32EstP (N32 Estrella Pentagonal) no son estables en las envolturas elegidas. Los resultados muestran novedosas formas geométricas que se obtienen entre distintas capas de envolturas y distintos tipos de núcleo que abren un abanico de posibilidades para el diseño experimental de nano estructuras estables.

Figura 10. Representación de los clústeres de MR, LJ y MO con su tipo de núcleo, números de colores de esferas del mismo radio y su potencial.

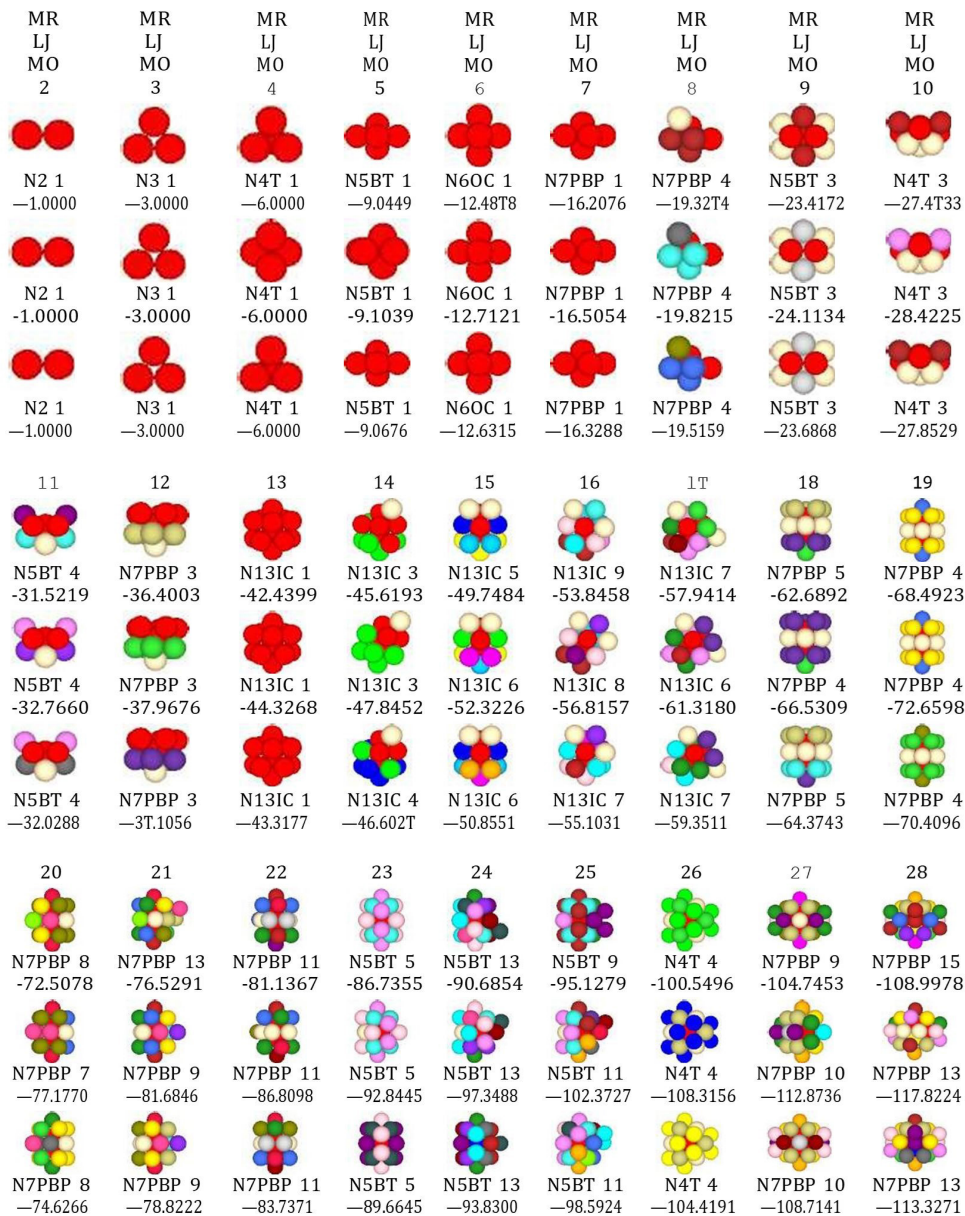


Figura 11. Representación de los clústeres de MR, LJ y MO con su tipo de núcleo, números de colores de esferas del mismo radio y su potencial.

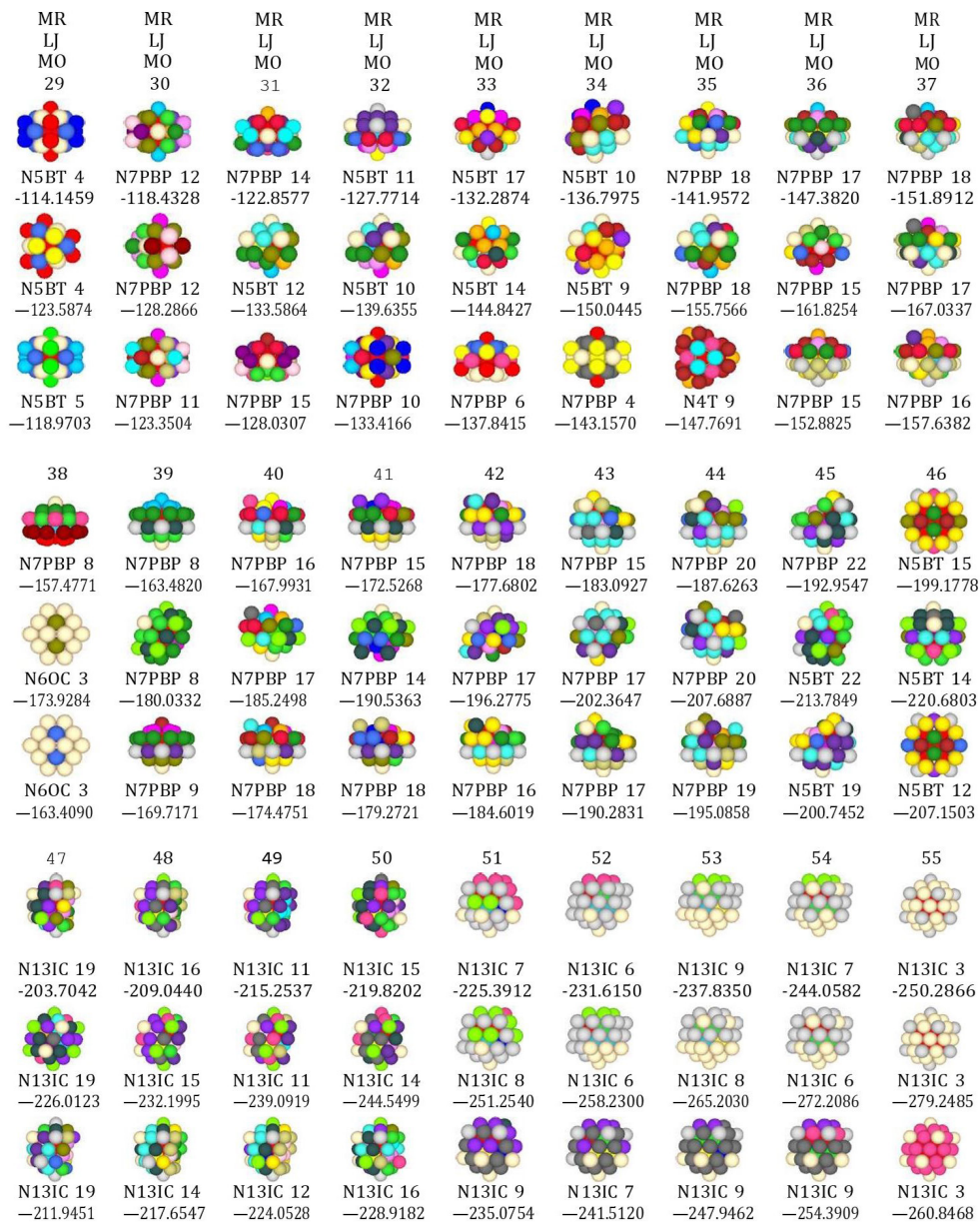


Tabla 1. Envoltura redondeada de lattice IC de 614 partículas, capas 5 y 6. Sin espacio interior para núcleos grandes o mantener la estructura de algunos núcleos pequeños.

Núcleo	LJ	MO	MR
	LJ→MO LJ→MR	MO→LJ MO→MR	MR→LJ MR→MO
		Estabilidad	
	-3464.5573	-3161.5262	-3026.9701
oLJ4	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
		Estable	
	X	-3170.4340	-3035.1504
N8CB		X	X
		X	X
		Inestable	
	-3505.5432	-3198.8640	-3063.4143
oLJ13	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
		Estable	
	X	-3195.8978	-3060.3357
N13IR		X	X
		X	X
		Inestable	
	X	X	X
N20BaIP		Inestable	
	X	X	X
N32EstP		Inestable	
	-3647.0086	-3319.5074	-3178.5605
oLJ38	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
		Estable	
	X	X	X
oLJ39		Inestable	

6 AGRADECIMIENTOS

Agradecimiento a los organizadores del XIV CIDIQ 2023 y al área de Álgebra, Geometría y Computación Científica. Este trabajo corresponde con el proyecto de Investigación del Área: Métodos Matemáticos y Computacionales para la Optimización de Cúmulos de Partículas bajo un pozo de potencial y Sistemas de Control sobre la Ecuación Semilineal Cúbica de Onda de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería de la UAM, unidad Azcapotzalco (Clave: CB006-22, Acuerdo: 671.4.3.2.4).

Tabla 2. Envoltura de latice IC de 2654 particulas, capas 11 y 12. Algunos núcleos no se mantienen.

Núcleo	LJ	MO	MR
	LJ→MO LJ→MR	MO→LJ MO→MR	MR→LJ MR→MO
Estabilidad bajo variación del potencial			
oLJ4	-14897.4997	-13621.0961	-13073.2003
	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
Estable			
N8CB	-14906.8185	-13629.9967	-13081.3791
	X	X	X
	X	X	✓
Inestable			
oLJ13	-14935.9207	-13658.4138	-13109.6402
	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
Estable			
N13IR	-14933.1494	-13655.4457	-13106.5610
	X oLJ13	X oLJ13	X oLJ13
	X oLJ13	X oLJ13	X oLJ13
	Inestable		
N20BaIP	-23906.0392	-21424.2778	-20383.1031
	X		X
	X	X	X
Inestable			
N32EstP	X	X	X
	X	X	X
	Inestable		
oLJ38	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
	Estable		
oLJ39	✓	✓	✓
	X	X	X
	Inestable		

Tabla 3. Envoltura de latice IC de 3656 partículas, capas 10, 11 y 12. Estabilidad por minimización y variación de potencial en casi todos los núcleos propuestos.

Núcleo	LJ	MO	MR
	LJ→MO	MO→LJ	MR→LJ
	LJ→MR	MO→MR	MR→MO
Estabilidad bajo variación del potencial			
oLJ4	-23873.6788	-21395.3864	-20355.9404
	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
Estable			
N8CB	-23883.0357	-21404.2870	-20364.1192
	X	✓	X
	X	✓	✓
Inestable			
oLJ13	-23912.1856	-21432.7041	-20392.3802
	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
Estable			
N13IR	-23909.4148	-21429.7360	-20389.3011
	X oLJ13	X oLJ13	X oLJ13
	X oLJ13	X oLJ13	X oLJ13
	Inestable		
N20BaIP	-23906.0392	-21424.2778	-20383.1031
	X	X	X
	X	X	X
Inestable			
N32EstP	-23971.9812	-21486.4488	-20444.3553
	X	X	X
	X	X	X
Inestable			
oLJ38	-24042.3418	-21552.7954	-20507.3473
	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
Estable			
oLJ39	-24048.4744	-21559.1035	-20513.4224
	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
Estable			

REFERENCIAS

Barrón-Romero, C. (2022a). The oLJ13_N13IC cluster is the global minimum cluster of Lennard Jones potential for 13 particles, 2022 IEEE 3rd International Conference on Electronics, Control, Optimization and Computer Science (ICECOCS), Fez, Morocco, 2022, pp. 1-6.

Barrón-Romero, C. (2022b). Estudio de sensibilidad y crecimiento de Nanoestructuras bajo los potenciales de Morse y Lennard Jones, *Revista Tendencias en Docencia e Investigación Química* 2022, 508-515.

Barrón-Romero, C. (2005). Minimum search space and efficient methods for structural cluster optimization. arXiv, <http://arxiv.org/abs/math-ph/0504030>. *To honor the CIMAT's XXV Anniversary*.

Barrón-Romero, C., Gómez, S., y Romero, D. (1997). Lower Energy Icosahedral Atomic Cluster with Incomplete Core. *Applied Mathematics Letters*, 10(5):25-28.

Barrón-Romero, C., Gómez, S., Romero, D., y Saavedra, A. (1999). A Genetic Algorithm for Lennard-Jones Atomic clusters. *Applied Mathematics Letters*, 12:85-90.

Beale, E. M. L. (1972). A derivation of conjugate-gradients. In Lootsma, F., editor, *Numerical methods for nonlinear optimization*. Academic Press.

Byrd, R. H., Lu, P., Nocedal, J., y Zhu, C. (1995). A limited memory algorithm for bound constrained optimization. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 16(5):1190-1208.

Cai, W., Feng, Y., Shao, X., y Pan, Z. (2002a). Optimization of Lennard-Jones atomic clusters. *THEOCHEM*, 579:229-34.

Cai, W., Jiang, H., y Shao, X. (2002b). Global optimization of Lennard-Jones clusters by a parallel fast annealing evolutionary algorithm. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 42(5):1099-1103.

Deaven, D. M. y Ho, K. M. (1995). Molecular Geometry Optimization with a Genetic Algorithm. *Physical Review Letters*, 75(2):288-291.

Dittner, M. y Hartke, B. (2016). Conquering the hard cases of Lennard-Jones clusters with simple recipes. *Computational and Theoretical Chemistry*.

Doye, J. P. K. (1998). Thermodynamics and the global optimization of Lennard-Jones clusters. *Journal of Chemical Physics*, 109(19):8143-8153.

Doye, J. P. K. (2006). *Physical Perspectives on the Global Optimization of Atomic Clusters*, pages 103-139. Springer US, Boston, MA.

Doye, J. P. K. y Wales, D. J. (1995). Magic numbers and growth sequences of small face-centered-cubic and decahedral clusters. *Chemical Physics Letters*, 247:339-347.

Doye, J. P. K., Miller, M.A. y Wales, D. J. (1999). The double-funnel energy landscape of the 38-atom Lennard-Jones cluster. *The Journal of Chemical Physics*, 110(14): 6896--6906.

Echt, O., Sattler, K. y Recknagel, E. Magic Numbers for Sphere Packings: Experimental Verification in Free Xenon Clusters. *Phys. Rev. Letters*, 47:1121, October 1981.

Gómez, S. y Barrón-Romero, C. (1991). The Exponential Tunneling Method. Technical Report Research Report 3(1), IIMAS-UNAM.

Haberland, H., Hippler, T., Donges, J., Kostko, O., Schmidt, M., y Issendorff, B. V. (2005). Melting of Sodium Clusters: Where Do the Magic Numbers Come from? *Physical Review Letters*, 94:035701-4.

Hartke, B. (1999). Global Cluster geometry Optimization by a Phenotype Algorithm with Niches:

- Location of Elusive Minima, and Low-Order Scaling with Cluster Size. *Journal of Computational Chemistry*, 20(16):1752-1759.
- Hartke, B. (2002). Structural transitions in clusters. *Angewandte Chemie International Edition*, 41(9):1468-1487.
- Hoare, M. R. y McInnes, J. A. (1983). Morphology and statistical statics of simple microclusters. *Advances in Physics*, 32(5):791-821.
- Huang, H. X., Pardalos, P. M., y Shen, Z. J. (2002). Equivalent formulations and necessary optimality conditions for the Lennard-Jones problem. *Journal of Global Optimization*, 22(1-4):97-118.
- Jiang, H., Cai, W., y Shao, X. (2003). New lowest energy sequence of marks' decahedral Lennard-Jones clusters containing up to 10,000 atoms. *Journal of Physical Chemistry A*, 107(21):4238-4243.
- Leary, R. H. (1997). Global Optima of Lennard-Jones Clusters. *Journal of Global Optimization*, 11(1):35-53.
- Leary, R. H. (1999). Tetrahedral global minimum for the 98-atom Lennard-Jones cluster. *Physical Review E*, 60(6):6320-6322.
- Maier, R., Rosen, J., y Xue, G. (1992). A discrete-continuous algorithm for molecular energy minimization. In *Proceedings. Supercomputing '92. (Cat. No.92CH3216-9)*, 16-20 Nov. 1992, *Proceedings. Supercomputing '92. (Cat. No.92CH3216-9)*, 778-786.
- Maranas, C. D. y Floudas, C. A. (1994). Global minimum Potential Energy Conformations of Small Molecules. *Journal of Global Optimization*, 4(2):135-170.
- Morales, J. L. y Nocedal, J. (2011). Remark on „algorithm 778: L-BFGS-B: Fortran subroutines for large-scale bound constrained optimization“. *ACM Transactions on Mathematical Software*, (7).
- Morse, P. M. (1929). Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels. *Phys. Rev.*, 34:57-64.
- Northby, J. A. (1987). Structure and binding of Lennard-Jones clusters: $13 \leq n \leq 147$. *Journal of Chemical Physics*, 87(10):6166-6177.
- Noya, E. G., Wong, Ch. K., Llombart, P y Doye, J. P. K. How to design an icosahedral quasicrystal through directional bonding, *Nature*, 596, August, 2021.
- Pardalos, P. M., Shalloway, D., y Xue, G. L. (1994). Optimization methods for computing global minima of nonconvex potential-energy functions. *Journal of Global Optimization*, 4(2):117-133.
- Shao, X., Jiang, H., y Cai, W. (2004a). Parallel random tunneling algorithm for structural optimization of Lennard-Jones clusters up to $n = 330$. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 44(1):193-199.
- Shao, X., Xiang, Y., y Cai, W. (2004b). Formation of the central vacancy in icosahedral Lennard-Jones clusters. *Chemical Physics*, 305(1-3):69-75.
- Shao, X., Xiang, Y., y Cai, W. (2005). Structural Transition from Icosahedra to Decahedra of Large Lennard-Jones Clusters. Personal Communication.
- Solov'yov, I. A., Solov'yov, A. V., y Greiner, W. (2003). Fusion process of Lennard-Jones clusters: global minima and magic numbers formation. *ArXiv Physics e-prints*, pages 1-47.

Wales, D. J. y Doye, J. P. K. (1997). Global Optimization by Basin-Hopping and the Lowest Energy Structures of Lennard-Jones Clusters Containing up to 110 Atoms. *J. Phys. Chem. A.*, 101(28):5111-5116.

Wales, D. J., Doye, J. P. K., Dullweber, A., Hodges, M. P., Naumkin, F. Y., Calvo, F., Hernández-Rojas, J., y Middleton, T. F. The Cambridge Cluster Database, Lennard-Jones clusters, <https://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>.

Wille, L. T. (1999). Lennard-Jones Clusters and the Multiple-Minima Problem. *Annual Reviews of Computational Physics*, VII:25-60.

Wolf, M. y Landman, U. (1998). Genetic Algorithms for Structural Cluster Optimization. *Journal of Physical Chemistry A*, 102(30):6129-6137.

Xiang, Y., Cheng, L., Cai, W., y Shao, X. (2004a). Structural distribution of Lennard-Jones clusters containing 562 to 1000 atoms. *Journal of Physical Chemistry A*, 108(44):9516-9520.

Xiang, Y., Jiang, H., Cai, W., y Shao, X. (2004b). An Efficient Method Based on Lattice Construction and the Genetic Algorithm for Optimization of Large Lennard-Jones Clusters. *Journal of Physical Chemistry A*, 108(16):3586-92.

SOBRE O ORGANIZADOR

Xosé Somoza Medina (1969, Ourense, España) Licenciado con Grado y premio extraordinario en Geografía e Historia por la Universidad de Santiago de Compostela (1994). Doctor en Geografía e Historia por la misma universidad (2001) y premio extraordinario de doctorado por su Tesis “Desarrollo urbano en Ourense 1895-2000”. Profesor Titular en la Universidad de León, donde imparte clases desde 1997. En la Universidad de León fue Director del Departamento de Geografía entre 2004 y 2008 y Director Académico de la Escuela de Turismo entre 2005 y 2008. Entre 2008 y 2009 ejerció como Director del Centro de Innovación y Servicios de la Xunta de Galicia en Ferrol. Entre 2007 y 2009 fue vocal del comité “Monitoring cities of tomorrow” de la Unión Geográfica Internacional. En 2012 fue Director General de Rehabilitación Urbana del Ayuntamiento de Ourense y ha sido vocal del Consejo Rector del Instituto Ourenseño de Desarrollo Local entre 2011 y 2015. Ha participado en diversos proyectos y contratos de investigación, en algunos de ellos como investigador principal, con temática relacionada con la planificación urbana, la ordenación del territorio, las nuevas tecnologías de la información geográfica, el turismo o las cuestiones demográficas. Autor de más de 100 publicaciones relacionadas con sus líneas de investigación preferentes: urbanismo, turismo, gobernanza, desarrollo, demografía, globalización y ordenación del territorio. Sus contribuciones científicas más importantes se refieren a la geografía urbana de las ciudades medias, la crisis del medio rural y sus posibilidades de desarrollo, la evolución del turismo cultural como generador de transformaciones territoriales y más recientemente las posibilidades de reindustrialización de Europa ante una nueva etapa posglobalización. Ha participado como docente en masters y cursos de especialización universitaria en Brasil, Bolivia, Colombia, Paraguay y Venezuela y como docente invitado en la convocatoria Erasmus en universidades de Bulgaria (Sofía), Rumanía (Bucarest) y Portugal (Porto, Guimarães, Coimbra, Aveiro y Lisboa). Ha sido evaluador de proyectos de investigación en la Agencia Estatal de Investigación de España y en la Organización de Estados Iberoamericanos (OEI). Como experto europeo en Geografía ha participado en reuniones de la Comisión Europea en Italia y Bélgica. Impulsor y primer coordinador del proyecto europeo URBACT, “come Ourense”, dentro del Programa de la Unión Europea “Sostenibilidad alimentaria en comunidades urbanas” (2012-2014). Dentro de la experiencia en organización de actividades de I+D+i se pueden destacar la organización de diferentes reuniones científicas desarrolladas dentro de la Asociación de Geógrafos Españoles (en 2002, 2004, 2012 y 2018).

ÍNDICE REMISSIVO

A

Abonos orgánicos 159, 163

Administración Estratégica 54, 76, 89, 92, 94, 102

Agricultura sostenible 159

Alimentos nutraceuticos 165

Análisis de puestos 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77

Aporte térmico 215, 219, 220, 221, 222, 223, 224, 225

C

Capacidades dinámicas 2, 21, 25

Competitividad 2, 9, 14, 28, 30, 34, 39, 41, 45, 47, 48, 49, 51, 52, 53, 54, 63, 66, 74, 76, 77, 79, 81, 86, 87, 88, 90, 93, 124

Comportamiento organizacional 104

Compost 159, 163

Conocimiento 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 28, 30, 33, 47, 48, 50, 51, 55, 59, 61, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 93, 100, 119, 126, 127, 128, 130, 131, 132, 154, 202

Cuenca 170, 171, 174

D

Desarrollo web 133

Descripción de puestos 39, 42, 47, 50, 56, 58, 62, 63, 67, 72, 73, 74, 75, 76, 77

Deslizamiento 170, 174

Dimensiones culturales 103, 104

Dinámica molecular 197

E

Ecosistema empresarial 2

Ecosistemas de investigación 126, 128, 129, 130

Educación 19, 24, 26, 34, 35, 89, 93, 101, 102, 113, 117, 118, 121, 127, 129, 130, 131

Electrocatalyst 185, 195, 196

Emisiones potenciales 175, 181, 182, 183

Empresa 7, 10, 12, 15, 19, 20, 21, 22, 24, 26, 27, 28, 29, 31, 32, 33, 37, 40, 42, 43, 44, 45, 47,

49, 50, 51, 53, 54, 56, 58, 61, 63, 64, 65, 67, 70, 72, 74, 75, 76, 77, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 91, 92, 93, 94, 95, 97, 99, 100, 101, 104, 105, 107, 108, 111, 112, 216

Era digital 113, 116, 123

F

Factor de conversión 175, 180

Formación profesional 113, 131

Fuel cell 185, 186, 196

G

GDPR 143, 148

GEI 175, 176, 177, 178, 179, 180, 181, 182, 183

Gestión del conocimiento 2, 3, 4, 5, 13, 18, 20, 79, 80, 81, 85, 86, 87, 88

Gestión de recursos humanos 39, 66, 73

Gestión de residuos 159

Gestión empresarial 2, 7, 8, 18, 21

GTAW 215, 216, 217, 218, 221

I

Inambari 170, 171, 172, 174

Incendios forestales 175, 176, 177, 183, 184

Inconel 718 215, 216, 217, 218, 222, 223, 225, 226

Innovación 1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 36, 46, 48, 52, 53, 63, 66, 74, 75, 80, 83, 90, 91, 102, 114, 121, 128, 130, 132, 184

Innovación sostenible 1, 2, 3, 4, 6, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22

L

Legislazione argentina 143, 151, 152

Legislazione messicana 143, 154

Livello adeguato 143, 149, 150

M

Maíz pigmentado 165, 166

Michoacán 113, 114, 116, 119, 120, 123, 124, 125, 164, 215

N

Nanoquímica 197

O

Oxygen reduction 185, 186, 187, 191, 192, 193, 194, 195, 196

P

Patrones de diseño 133

Peligro geológico 170, 174

Perfil del puesto 39, 72

Pigmentos vegetales 165

Planeación 20, 22, 34, 54, 76, 82, 97, 103, 104, 105, 106, 108, 109, 111, 112, 177

Pyme 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 13, 16, 17, 18, 20, 21, 22, 38, 39, 40, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 51, 52, 53, 54, 55, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 67, 71, 72, 73, 74, 75, 79, 81, 87, 105, 111, 112, 124

Pyme familiar 79

PYMES 38, 39, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 48, 49, 50, 51, 53, 54, 55, 57, 58, 59, 60, 61, 63, 66, 68, 74, 75, 79, 81, 83, 88, 89, 90, 93, 94, 96, 101, 102

Q

Química de materiales 197

R

Rendimientos a escala 26

Residuos cítricos 159, 160, 163

Riesgo de desastre 170, 174

Rotating disc electrode 185, 188, 191

S

Segregación y microestructura 215

Software 112, 133, 134, 136, 141, 142, 213

T

Tafel slope 185, 193, 194, 195

Transformación Digital 89, 90, 91, 92, 93, 94, 100, 101, 102

Trasferimento internazionale di dati 143

Turismo cultural 113, 114, 115, 116, 117, 118, 119, 120, 121, 122, 123, 124, 125, 227

U

Universidades 4, 24, 125, 126, 128, 129, 130, 132, 227

Z

Zea mays 165