

VOL I

Ramon González Calvet
(Organizador)

PESQUISA
E DOCENCIA
EM
CIENCIAS
EXATAS
E NATURAIS



EDITORA
ARTEMIS
2026

VOL I

Ramon González Calvet
(Organizador)

PESQUISA
E DOCENCIA
EM
CIENCIAS
EXATAS
E NATURAIS



EDITORA
ARTEMIS

2026

2026 by Editora Artemis
Copyright © Editora Artemis
Copyright do Texto © 2026 Os autores
Copyright da Edição © 2026 Editora Artemis



O conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição Creative Commons Atribuição-Não-Comercial Não-Derivativos 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	Antonella Carvalho de Oliveira
Editora Executiva	M. ^a Viviane Carvalho Mocellin
Direção de Arte	M. ^a Bruna Bejarano
Diagramação	Elisangela Abreu
Organizador	Prof. Dr. Ramon González Calvet
Imagem da Capa	sharuzzaman/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*
Dr. Cristo Ernesto Yáñez León – *New Jersey Institute of Technology, Newark, NJ, Estados Unidos*



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 Emilias Darlene Carmen Lebus, *Universidad Nacional del Nordeste*, 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.ª Dr.ª Galina Gumovskaya – *Higher School of Economics*, Moscow, Russia
Prof. Dr. Geoffroy Roger Pointer 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. Guillermo Julián González-Pérez, *Universidad de Guadalajara*, México
Prof. Dr. Håkan Karlsson, *University of Gothenburg*, Suécia
Prof.ª Dr.ª Lara 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 Godinez, *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. Juan Porras Pulido, *Universidad Nacional Autónoma de México*, 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 Rodriguez, *Universidad Santiago de Compostela*, Espanha
Prof. Dr. Manuel Simões, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Portugal
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 da Luz Vale Dias – Universidade de Coimbra, Portugal
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 MªGraça Pereira, Universidade do Minho, Portugal
Prof.ª Dr.ª Maria Gracinda Carvalho Teixeira, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil
Prof.ª Dr.ª María Guadalupe Vega-López, *Universidad de Guadalajara*, México
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. Dr. Melchor Gómez Pérez, Universidad del Pais Vasco, Espanha
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 Susana Álvarez Otero – Universidad de Oviedo, Espanha

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)**

P475 Pesquisa e docência em ciências exatas e naturais [livro eletrônico] / Organizador Ramon González Calvet. – 1. ed. – Curitiba, PR: Editora Artemis, 2026.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Edição bilíngue

Inclui bibliografia.

ISBN 978-65-82858-10-9

DOI 10.37572/EdArt_270626109

1. Ciências exatas. 2. Ciências naturais. 3. Pesquisa científica. 4. Docência. I. González Calvet, Ramon.

CDD 500

Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422



PRÓLOGO

La producción del conocimiento científico y educativo en el campo de las ciencias exactas y naturales se caracteriza, cada vez más, por su capacidad de articular fundamentos teóricos, desarrollos tecnológicos, prácticas formativas y compromisos sociales. En este contexto, el primer volumen de ***Pesquisa e Docência em Ciências Exatas e Naturais*** reúne un conjunto plural de trabajos que evidencian la vitalidad de la investigación contemporánea y la importancia de repensar la docencia como espacio de construcción, mediación y circulación del saber.

Los capítulos que integran esta obra permiten percibir la amplitud de un campo que no se limita a la transmisión de contenidos de disciplinas científicas, sino que se abre a problemas complejos, metodologías diversas y experiencias docentes. La investigación matemática, físico-química y computacional convive aquí con la ingeniería aplicada, la inteligencia artificial, la ética profesional, la educación matemática, la enseñanza de las ciencias, la formación superior y la preservación del conocimiento paleontológico. Esta diversidad temática refleja una visión amplia de las ciencias exactas y naturales, entendidas no solo como áreas de formulación abstracta y experimentación técnica, sino también como prácticas humanas, educativas e institucionales.

El volumen se inicia con trabajos dedicados a la modelización matemática, físico-química y al estudio de sistemas complejos. En este primer conjunto, se abordan problemas relacionados con operadores diferenciales, semigrupos de contracciones, isothermas de adsorción, gases reales, potenciales de Lennard-Jones y Morse, nanoestructuras y configuraciones de mínimo potencial. Estos capítulos destacan la importancia de la modelización, la abstracción y la simulación en la comprensión de fenómenos naturales y materiales.

En un segundo momento, la obra se orienta hacia las tecnologías aplicadas, la ingeniería y los medios digitales en la formación científica. Los trabajos reunidos en esta parte muestran cómo el desarrollo tecnológico puede contribuir tanto a la creación de dispositivos y soluciones aplicadas como a la transformación de los procesos formativos. La presencia de estudios sobre electroestimulación, generación de gráficos vectoriales mediante reconocimiento de voz, aprendizaje profundo e inteligencia artificial en contextos universitarios evidencia la necesidad de repensar la innovación técnica junto con sus implicaciones educativas, epistemológicas y profesionales.

La tercera parte concentra investigaciones orientadas a la docencia, el aprendizaje y la equidad en contextos educativos diversos. Los capítulos analizan cuestiones vinculadas a la ética en ingeniería, a la inclusión en educación matemática,

al liderazgo y desempeño docente, a las actitudes hacia la estadística, al aprendizaje basado en proyectos, a la relación entre sueño y aprendizaje, y a la calidad educativa en la formación superior en odontología. En conjunto, estos trabajos subrayan que enseñar ciencias y matemáticas exige mucho más que dominio de la disciplina: requiere sensibilidad pedagógica, reflexión institucional, innovación metodológica y atención a las condiciones reales de aprendizaje de los estudiantes.

Finalmente, el volumen se cierra con una contribución singular dedicada a las ciencias naturales, los acervos fósiles y la preservación del conocimiento paleontológico. A partir de una trayectoria de décadas en la prospección, colección y exhibición de fósiles, este capítulo invita a reflexionar sobre la colaboración entre iniciativas privadas, museos, universidades e instituciones científicas. Su presencia al final de la obra ofrece un cierre significativo, al recordar que la ciencia también depende de la conservación, documentación y accesibilidad de los materiales que permiten reconstruir la historia natural.

De este modo, ***Pesquisa e Docência em Ciências Exatas e Naturais*** propone una lectura que avanza desde los fundamentos científicos y matemáticos hacia las aplicaciones tecnológicas, los medios digitales, los desafíos de la enseñanza y la preservación del patrimonio natural. La obra evidencia que investigar y enseñar están profundamente interrelacionadas: toda investigación produce nuevas preguntas para la formación, y toda práctica docente comprometida puede convertirse en espacio de investigación, innovación y transformación. De hecho, solo se puede enseñar bien a los estudiantes aquel conocimiento que los investigadores antes comprendieron bien.

Esperamos que este volumen contribuya al diálogo entre investigadores, docentes, estudiantes y profesionales interesados en las ciencias exactas y naturales, fortaleciendo una perspectiva integradora, crítica y colaborativa del conocimiento. Que los trabajos aquí reunidos sirvan como punto de partida para nuevas investigaciones, nuevas prácticas pedagógicas y nuevas formas de aproximarse a los desafíos científicos y educativos de nuestro tiempo.

Ramon González Calvet

SUMARIO

MODELACIÓN MATEMÁTICA, FÍSICO-QUÍMICA Y ESTRUCTURAS EN SISTEMAS COMPLEJOS

CAPÍTULO 1.....1

CONTRAST WITH THE HILLE-YOSIDA'S THEOREM AND THE CONTRACTION SEMIGROUP FOR AN ODD-ORDER DIFFERENTIAL OPERATOR

Yolanda Silvia Santiago Ayala

 https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261091

CAPÍTULO 2.....17

ISOTERMA DE ADSORCIÓN DEDUCIDA DEL MODELO DEL BILLAR Y ECUACIÓN DE ESTADO APLICADA A LOS GASES REALES

Ramon González Calvet

 https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261092

CAPÍTULO 3.....32

VERDADERAS NANOESTRUCTURAS DE MÍNIMO POTENCIAL GLOBAL DE LENNARD JONES Y MORSE

Carlos Barrón Romero

 https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261093

CAPÍTULO 4..... 48

NUEVAS PEQUEÑAS NANOESTRUCTURAS DE MÍNIMO POTENCIAL DE LENNARD JONES Y MORSE

Carlos Barrón Romero

 https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261094

TECNOLOGÍAS APLICADAS, INGENIERÍA Y MEDIOS DIGITALES EN LA FORMACIÓN CIENTÍFICA

CAPÍTULO 5..... 66

DISEÑO Y GENERACIÓN DE UN ELECTROESTIMULADOR TENS CON DIFERENTES TIPOS DE PULSOS

Eduardo García Sánchez

Luis Eduardo Bañuelos García

Mario Molina Almaraz
Osbaldo Vite Chávez
José Manuel Cervantes Viramontes
María del Rosario Martínez Blanco
Luis Octavio Solís Sánchez
Irerí Aydee Sustaita Torres
Pilar Cecilia Godina González
Francisco Javier Martínez Ruíz
Sahara Araceli Pereyra López
Ana Lourdes Aracely Borrego Elías

 https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261095

CAPÍTULO 6..... 84

GRÁFICOS VECTORIALES SVG GENERADOS A PARTIR DE INSTRUCCIONES POR VOZ MEDIANTE LA LIBRERÍA *SPEECH RECOGNITION*

Moisés García Villanueva
Salvador Ramírez Zavala

 https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261096

CAPÍTULO 7 99

DE LAS REDES NEURONALES RECURRENTES A LOS TRANSFORMADORES: EVOLUCIÓN Y ANÁLISIS CRÍTICO DE LOS PARADIGMAS FUNDAMENTALES DEL APRENDIZAJE PROFUNDO

Adolfo Melendez Ramirez
Francisco Jacob Avila Camacho
Juan Manuel Stein Carrillo
Leonardo Miguel Moreno Villalba

 https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261097

CAPÍTULO 8..... 116

DISRUPCIÓN ALGORÍTMICA Y CONFIGURACIÓN DEL SABER INVESTIGATIVO: LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL COMO DISPOSITIVO EPISTEMOLÓGICO EN ESTUDIANTES UNIVERSITARIOS DE ICA, PERÚ

José Ángel Meneses Jiménez
Pedro Julián Ormeño Carmona
Manuel Rocha Gonzales
Beny Pasquel Flores
Jorge Luis Arrué Flores

 https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261098

DOCENCIA, APRENDIZAJE Y EQUIDAD EN MATEMÁTICAS, CIENCIAS Y FORMACIÓN SUPERIOR

CAPÍTULO 9.....129

INCLUSIÓN Y EQUIDAD EN EDUCACIÓN MATEMÁTICA: PERSPECTIVAS TEÓRICAS Y DEBATES ACTUALES

Carmen Cecilia Espinoza Melo

Erich Leighton Vallejos

 https://doi.org/10.37572/EdArt_2706261099

CAPÍTULO 10.....138

PERCEPCIÓN ESTUDIANTIL SOBRE EL LIDERAZGO Y DESEMPEÑO DOCENTE DE PROFESORES DE MATEMÁTICAS Y SU RELACIÓN CON LOS RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Francisco Javier Saavedra Álvarez

Raúl Arnaldo Fuentes Fuentes

Paola Ramírez González

 https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610910

CAPÍTULO 11.....165

ELIMINANDO ACTITUDES NEGATIVAS HACIA LA ESTADÍSTICA EN PSICOLOGÍA: EFECTOS DEL APRENDIZAJE DEL ANÁLISIS DE TEXTOS

Luis Fernando González Beltrán

Olga Rivas García

 https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610911

CAPÍTULO 12.....175

¿QUÉ FUNCIONA (Y QUÉ NO) PARA INCORPORAR LA ÉTICA COMO COMPETENCIA TRANSVERSAL EN ESTUDIOS DE INGENIERÍA?

Ester Gimenez-Carbo

Lourdes Soriano Martínez

 https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610912

CAPÍTULO 13.....183

DEL AULA AL ENTORNO: EL APRENDIZAJE BASADO EN PROYECTOS COMO ESTRATEGIA PARA LA ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA AMBIENTAL

Elizabeth Gonzalez Sepúlveda

Victor Neira

Felipe Neira

 https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610913

CAPÍTULO 14..... 194

CORRELACIÓN ENTRE EL SUEÑO Y EL APRENDIZAJE EN ESTUDIANTES DE MEDICINA: UNA REVISIÓN SISTEMÁTICA

Juan Camilo González Torres

Orlando Miguel González Torres

Irina Tirado Ballestas

 https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610914

CAPÍTULO 15.....206

HABLANDO DE CALIDAD EDUCATIVA EN LA FORMACIÓN SUPERIOR EN ODONTOLOGÍA: DESAFÍOS EN LA DOCENCIA DE LAS CIENCIAS DE LA SALUD

Martha Patricia de la Rosa-Basurto

Jesús Rivas-Gutiérrez

Nelly Alejandra Rodríguez Guajardo

Christian Starlight Franco-Trejo

Luz Patricia Falcón-Reyes

Alejandra Estefania Esquivel-Lozano

Zitzingore Janitzi López-Aguilar

 https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610915

CIENCIAS NATURALES, ACERVOS Y PRESERVACIÓN DEL CONOCIMIENTO PALEONTOLÓGICO

CAPÍTULO 16.....220

40 YEARS AS A FOSSIL PROSPECTOR, COLLECTOR, AND EXHIBITION MAKER

H.J. "Kirby" Siber

 https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610916

ACERCA DEL ORGANIZADOR.....231

ÍNDICE ALFABÉTICO..... 232

CAPÍTULO 3

VERDADERAS NANOESTRUCTURAS DE MÍNIMO POTENCIAL GLOBAL DE LENNARD JONES Y MORSE

Data de submissão: 05/05/2026

Data de aceite: 19/05/2026

Carlos Barrón Romero

Universidad Autónoma Metropolitana

Unidad Azcapotzalco

CDMX, México

<https://orcid.org/0000-0003-2435-6645>

RESUMEN: El diseño molecular y el estudio de las nanoestructuras por Química Computacional, usando potenciales 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 clústeres de partículas complementaria a las costosas investigaciones experimentales. Este trabajo presenta nuevos métodos de exploración para la determinación de clústeres de pocas partículas o nanoestructuras estables en el sentido de que su potencial sea mínimo local y global verdadero, i.e., tienen un potencial mínimo en una vecindad y su gradiente es muy pequeño y se preserva el de potencial más pequeño. Su importancia radica en que su potencial es estable y que estos clústeres de mínimo potencial global se han encontrado en la naturaleza o bien se han diseñado experimentalmente. Los nano clústeres de mínimo potencial global aparte

de ser estables representan la configuración límite de mínimo potencial que se puede alcanzar, o sea, no hay otra de menor potencial y su determinación es un problema abierto porque solo se conocen los clústeres óptimos globales para 2, 3 y 4 partículas. En un trabajo reciente se estableció la optimalidad global del clúster de 13 partículas bajo el potencial de Lennard Jones usando la ecuación Característica de Euler sobre su capa exterior. La metodología de este trabajo su sustenta teóricamente sobre formulaciones o variaciones de potenciales de Morse y del potencial de Lennard Jones. Los resultados muestran por primera vez que los conocidos posibles clústeres óptimos globales de 5 a 13 partículas conocidos algunos desde 1987 son las formas geométricas que corresponden a los verdaderos clústeres globales para sus respectivos potenciales.

PALABRAS-CLAVE: química de materiales; nanoquímica; dinámica molecular.

TRUE GLOBAL MINIMUM POTENTIAL NANOSTRUCTURES OF LENNARD JONES AND MORSE

ABSTRACT: Molecular design and the study of nanostructures using computational chemistry, for example, under Van der Waals potentials such as Morse and Lennard Jones potentials, is a way to model and predict new particle nanocluster structures that complements costly experimental investigations. This work

presents new exploration methods for determining clusters of a few particles or stable nanostructures, meaning that their potential is a local or global minimum, i.e., they have a minimum potential in a neighborhood, and their gradient is very small, and the one with the smallest potential is preserved. Their importance lies in the fact that their potential is stable and that these minimum potential clusters have been found in nature or have been experimentally designed. Global minimum potential nanoclusters, besides being stable, represent the limiting configuration of minimum potential that can be achieved; that is, there is no other configuration with a lower potential, and their determination is an open problem because only the global optimum clusters for 2, 3, and 4 particles are known. In recent work, the global optimality of the 13-particle cluster under the Lennard Jones potential was established using the Euler characteristic equation on its outer shell. The methodology of this work is theoretically based on formulations or variations of Morse potential and the Lennard Jones potential. The results show for the first time that the known possible global optimal clusters of 5 to 13 particles, some of which have been known since 1987, are the geometric shapes that correspond to the true global clusters for their respective potentials.

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). La determinación de la optimalidad global del clúster de 13 partículas bautizado como oLJ13_N13IC se muestra en Barron 2022a.

2. METODOLOGIA

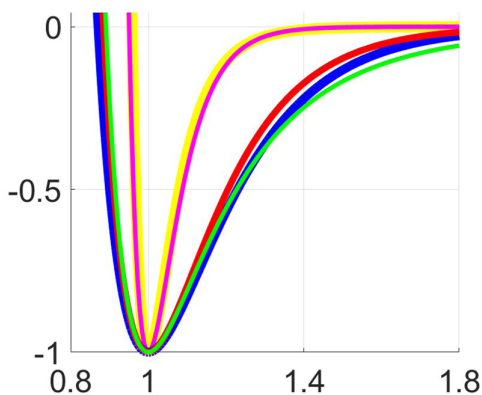
La experimentación numérica en este trabajo utiliza dos funciones de potencial de Van Der Waals que cumplen las propiedades de un pozo de potencial (Pardalos et al., 1994):

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

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

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). Para contrastar la influencia de la forma del valle de minimización se agregan $MC(d)=\text{Morse}(14,d)$ y $LC(d) = \frac{1}{d^{32}} - \frac{2}{d^{16}}$. A lo largo del trabajo, PT se refiere a cualesquiera de LC, LJ, MC, MO y MR. La métrica es la distancia Euclidiana de 3D.

Figura 1. Potenciales de LC(amarillo), LJ (verde), MC(Magenta), MO (azul) y MR (rojo). Valle de atracción LC (amarillo, muy angosto), LJ (verde, referencia), MC (magenta, muy angosto), MO (azul, ancho) y MR (rojo, angosto).



La figura 1 muestra la gráfica de los potenciales respecto a la distancia entre partículas. Se distinguen en el valle de minimización o de atracción (o sea, alrededor de la distancia óptima 1) dos zonas respecto a distancias menores a 1, donde las fuerzas que genera el gradiente crean una zona de expansión de $(0.8,1)$ mientras que hay una zona de contracción en las distancias del intervalo $(1,0,\infty)$. O sea, las partículas están sujetas a fuerzas de expansión cuando su distancia es menor a uno y a fuerzas de contracción cuando su distancia es mayor a uno, o sea, en general las partículas de las capas exteriores ejercen una fuerza de contracción sobre las partículas de las capas interiores

y las capas de partículas a distancia menor a 1 ejercen una fuerza de expansión sobre todo en las partículas del núcleo.

Por medio de un desarrollo de Taylor de segundo orden alrededor de la distancia optima 1, las funciones LC, LJ, MC, MO y MR satisfacen: $LC(1+h) \approx -1+256h^2$, $LJ(1+h) \approx -1+36h^2$, $MO(1+h) \approx -1+28.681h^2$ y $MR(1+h) \approx -1+36h^2$ donde h es un valor pequeño.

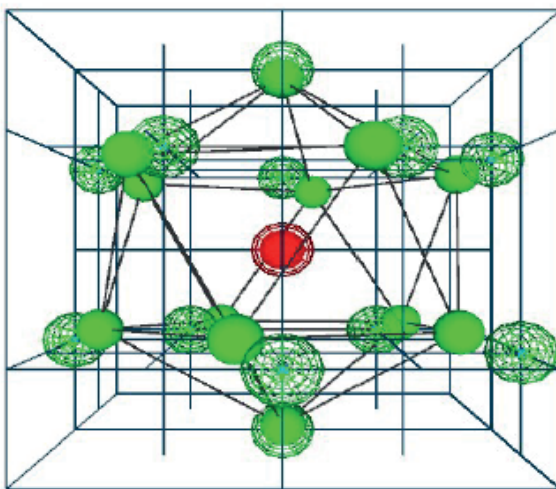
Tal aproximación indica que las partículas están fuertemente ligadas alrededor de la distancia optima 1 y junto con las zonas del valle de atracción se tiene las partículas formaran grupos de partículas a distancia 1 con una fuerza de expansión, mientras que las que están alejadas las comprimen. De forma experimental se determinó que las partículas tienen ligas fuertes o bonds (que forman el conjunto B de bonds, ver Maranas 1994) con distancias variando en el intervalo (0.9, 1.1). Además, las gráficas de los potenciales muestran que la fuerza de atracción que une a las partículas está limitada para no ser menor 0.9 porque se cae en la zona de repulsión.

La latice CB consiste en una red de cubos de arista de longitud dada. En particular con arista de tamaño 0.5 se tiene la latice $CB_{1/2}$.

Proposición. Coincidencia fuerte. (Strong Matching) Para cualquier mínimo local ($oPTn$) de n partículas ($2 \leq n \leq 2063$) de los potenciales LC, LJ, MC, MO y MR existe un clúster en $CB_{1/2}$, $pCBn$, tal que donde PT es LC, LJ, MC, MO y MR.

La figura 2 muestra un ejemplo de la coincidencia fuerte entre $oLJ13_N13IC$ y un grupo de partículas de la latice $CB_{1/2}$.

Figura 2. La latice $CB_{1/2}$ y los clústeres mínimos están muy cercanos. Los vértices de $CB_{1/2}$ se muestran como esferas de alambre y los vértices de $oLJ13_N13IC$ se muestran como esferas solidas.



La coincidencia fuerte requiere que el algoritmo de minimización sea consistente y determinístico como lo son los algoritmos GRG, L-BFGS-B. En este trabajo se usa la versión de FORTRAN de distribución libre y publica del algoritmo 778: L-BFGS-B de Morales y Nocedal, 2011.

La determinación de los clústeres mínimos locales o simplemente locales se usan las condiciones de tener un mínimo potencial en una vecindad apropiada y la norma del gradiente del orden de 10^{-4} .

Información de los clústeres de mínimo potencial se tiene en la página https://academicos.azc.uam.mx/cbr/OptClusters/comMRLJMO_01.htm. Donde todos los posibles clústeres mínimos globales publicados en dicha página satisfacen la condición de los estimadores de frontera, ver Barron 2023, otra fuente es *The Cambridge Cluster Database, Lennard-Jones clusters*, (<https://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>). Todos los clústeres tienen características comunes que son la base para la siguiente definición.

Definición. (Buen clúster) Un buen clúster de n partículas corresponde con un grafo conexo $(Vn, B(Vn))$ donde Vn es el conjunto de las coordenadas en 3D de los vértices y $B(Vn)$ son el conjunto de ligas fuertes (o bonds) con longitud que cae dentro del intervalo $(0.9, 1.1)$ y cuyos grados de sus vértices están entre 3 y 14 ligas. De aquí en adelante I_f denota las ligas fuertes, B el conjunto de I_f (set of Bonds) y NB el conjunto de diagonales o de las ligas de longitud mayor a 1.1.

Cabría esperar de que si $|B|$ es el de mayor valor para un número de partículas dado, el potencial de tal clúster será el mínimo global. Lo cual no ocurre en los casos conocidos de los posibles clústeres de mínimo potencial global. Por ejemplo, para 38 partículas bajo LJ, el posible óptimo global es oLJ38_N6OC_B144 de potencial -173.9284 mientras que oLJ38_N7PBP_B147 tiene -173.2524, el primero tiene menor $|B| = 144 < 147 = |B|$ del segundo. Su estructura geométrica dada por las I_f y la forma en que se ubican en el espacio las partículas para cumplir con que todas las longitudes de I_f están en el intervalo $(0.9, 1.1)$ dan origen al siguiente problema.

Definición. El problema geométrico de los buenos clústeres es:

Dado n determinar las posiciones de n partículas $Vn = \{p_i \in 3D \mid p_i \in Vn, i = 1, \dots, n\}$.

Tal que se tenga:

- $B(Vn) = \{I_{ij} = (p_i, p_j) \mid p_i, p_j \in Vn, i < j, \text{Dist}(p_i, p_j) \in (0.9, 1.1)\}$.
- El grafo resultante $(Vn, B(Vn))$ sea conexo y que los vértices bajo $B(Vn)$ tengan grado entre 3 y 14.
- Se busca que la mayoría $\text{Dist}(p_i, p_j) = 1.0$.

Se tiene una propiedad importante respecto al cálculo del potencial:

Propiedad de invariancia del cálculo del potencial bajo traslaciones (T) y rotaciones unitarias (R):

$$\begin{aligned} PT(RV_n + T) &= \\ \sum_{1 \leq i < j \leq n} PT(\text{Dist}(Rp_i + T, Rp_j + T)) &= \sum_{1 \leq i < j \leq n} PT(\text{Dist}(p_i, p_j)) \\ &= PT(V_n) \end{aligned}$$

Por otro lado, el problema de minimización de los clústeres es.

Definición. El problema de minimización local es: $\min_{PT} V_n$ donde $\arg \min_{PT} V_n$ es el clúster mínimo local lPT_n del conjunto de vértices dados $V_n = \{p_i \in 3D\}$.

Definición. El problema de minimización global para n partículas es

$$\min((\min_{PT} V_n^1), (\min_{PT} V_n^2), \dots, (\min_{PT} V_n^K))$$

Donde V_n^k , $k=1, \dots, K$ es el conjunto de los vértices de todos los posibles clústeres de n partículas. Estos conjuntos si bien son desconocidos no es infinito porque en 3D el problema geométrico de los buenos clústeres es finito, ya que $|B|$ tiene soluciones características finitas, por ejemplo, para $n = 2$, el clúster representante puede ser $\{(0,0,0), (1,0,0)\}$ ya por la propiedad de la invariancia del cálculo del potencial el mismo potencial se cumple para $\{(-0.5,0,0), (0.5, 0, 0)\}$, $\{(0, -0.5,0), (0, 0.5, 0)\}$, etc. Tal conjunto es infinito, pero fijando a un representante, ya que los demás son equivalentes se tiene $|B| = 1$ para 2 partículas. De hecho, para 3 y 4 partículas también se tiene $|B| = 1$.

Note que los clústeres locales de PT son buenos clústeres solo cuando son solución del problema geométrico de los buenos clústeres, y en tal caso se nombran buenos clústeres locales de PT. El rango de los grados es porque en 3D un triángulo equilátero forma un tetraedro cuyos grados de los vértices es 3. Algunos autores consideran 12 como el máximo número de vecinos por el icosaedro con partícula central (N13IC), ya que la partícula central tiene 12 vecinos, o sea tiene grado 12. Las latices IC, IF (ver Northby1987) han orientado esta limitación. La figura 1.G muestra el supra-icosaedro de 14 vértices (N15IC que tiene $|B|=50$, formado por 36 lf de longitud 1.04 (rojo), 12 lf de 0.95 (azul) y 2 lf de longitud 0.94 (naranja). Tiene 15 vértices de los cuales, 12 son de grado 6, 2 de grado 7 y uno (la partícula central) de grado 14. Este núcleo N15IC es el que determina la cota mayor de los grados de los buenos clústeres.

Northby en su artículo seminal (Northby 1987) enuncia el concepto de “growing sequence” para la lattice IF que significa los clústeres son parte de una secuencia creciente

de clústeres en dicha lattice. Con esta idea la determinación de los buenos clústeres se puede realizar de forma inductiva:

- 1) Para $n=4$ partículas el tetraedro es la solución global para PT y es única.
- 2) Para $n+1$ se toman las configuraciones de los buenos clústeres locales y en sus caras exteriores se agrega una partícula apropiadamente (que formen ligas cuyos de los grados sus vértices se mantengan entre 3 y 14 y se evitan los casos similares por simetría.

Generar todos los buenos clústeres de n partículas (familia de conjuntos que denominamos BC(n)) es muy relevante para la optimización global porque la minimización y preservación del buen clúster de mínimo potencial corresponde al proceso de búsqueda del clúster mínimo global. La garantía de que es el óptimo global es que no hay otros posibles candidatos. La justificación de que se obtuvieron los todos buenos clústeres se verifico manualmente y consiste en identificar como con los juegos para armar figuras con imanes circulares con vértices y barritas de longitud 1 con extremos de hierro y se comienza con un triángulo ($n=3$) y al unir el siguiente vértice necesariamente se obtiene el tetraedro ($n=4$) ya que es la única solución del problema geométrico de los buenos clústeres para 4 partículas que cumple la definición de buen clúster. Si fuera necesario se reacomodan los vértices y barritas para un nuevo arreglo y cuando se tienen todos los reacomodos que cumplen los grados entre 3 y 14, se agrega un nuevo vértice y las barritas necesarias.

En el artículo de Barrón-Romero, 2022a se demostró la optimalidad verdadera de gLJ13_N13IC centrada en los casos donde la capa exterior cumple la famosa Ecuación de Característica de Euler: $Vértices - Aristas + Caras = 2$. En ese trabajo se descartaron otras configuraciones como agrupaciones de tetraedros en línea con base un núcleo cúbico poque su distribución espacial dan significativamente más diagonales y muy pocas ligas fuertes, o sea por su estructura geométrica no eran candidatos a ser clústeres de mínimo potencial global. En este trabajo se incluyen tales candidatos y la optimización global se determina sobre la clase o familia de buenos clústeres.

3. DISEÑO DE LOS EXPERIMENTOS

Las simulaciones para determinar los verdaderos óptimos globales de PT se basan la construcción exhaustiva de los conjuntos BC(n) para n desde 5 hasta de forma inductiva.

Note que, si bien el tetraedro es la solución global de 4 partículas, el clúster local de base cuadrada más una partícula forma el buen clúster de 5 partículas pirámide

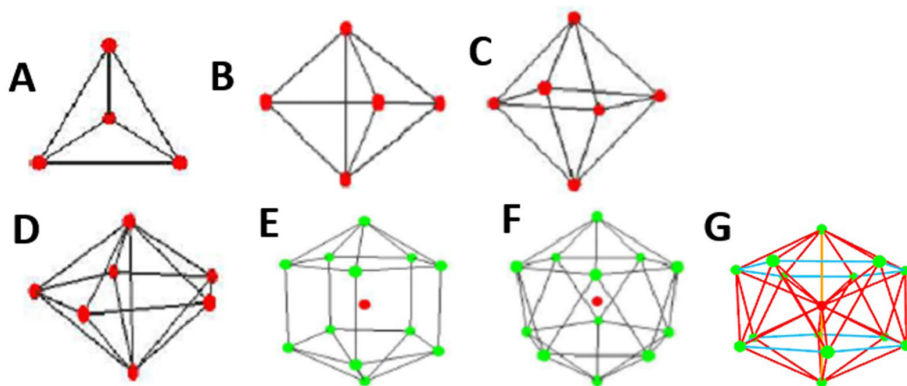
cuadrangular. Lo cual significa que solo hay dos clústeres en BC(5). Siguiendo el procedimiento inductivo se tiene que $|BC(6)| = 7$, $|BC(7)| = 9$, $|BC(8)| = 38$, $|BC(9)| = 50$, $|BC(10)| = 106$, $|BC(11)| = 231$, $|BC(12)| = 482$ y $|BC(13)| = 528$. Y sobre los conjuntos BC correspondiente se realizaron las optimizaciones y la selección de los verdaderos óptimos globales.

3.1. NÚCLEOS

Los núcleos seleccionados que se usan para identificar los primeros clústeres globales verdaderos se muestran en la figura 3. Fueron seleccionados de la lista de núcleos conocidos ver por ejemplo Dittner, M. y Hartke, B. 2016, Solov'yov, I. A., Solov'yov, A. V., y Greiner, W. 2003.

La forma de nombrar a los clústeres tiene el machote $xPTn_núcleo_Bm$ donde n es el número de partículas, $x=g$ es por verdadero global, $x=l$ es para un local, PT es el potencial correspondiente, núcleo es la abreviatura del núcleo de acuerdo con los nombres de los núcleos de la figura 3 y Bm denota $m=|B|$ que le corresponda. Otra forma es los $pCBn_xPT$ para los clústeres de la latice $CB_{1/2}$.

Figura 3. Núcleos **A.** N4T (Tetraedro), **B.** N5BT (Bipirámide triangular), **C.** N6OC (octaedro), **D.** N7PBP (Bipirámide pentagonal), **E.** N13IR (Poliedro pentagonal con pirámides pentagonales), **F.** N13IC (Icosaedro), **G.** N15IC (Supra-icosaedro de 14 vértices con partícula central).



4. RESULTADOS Y DISCUSION

La tabla 1 muestra un resumen de los verdaderos clústeres de mínimo potencial LC, LJ, MC, MO y MR.

Los clústeres globales tienen diferentes valores de potencial porque los potenciales PT tienen graficas diferentes, sin embargo, tienen la misma forma

geométrica para $n = 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$, ya que coinciden en el núcleo y la cardinalidad de B.

Para 11 partículas los potenciales de LJ, MO y MR tienen la misma forma geométrica y cardinalidad de B, por otro lado, MC y LC son diferentes en forma, el clúster de MC tiene núcleo N7PBP y el de LC tiene núcleo N4T y con cardinalidad de B (30) menor que la cardinalidad de B (31) de los clústeres de LJ, MO y MR.

Tabla 1. Los verdaderos clústeres de mínimo potencial global para $n = 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12$ y 13 partículas. Figura, nombre y potencial.





















				
gMR4_N4T_B6 -6.0000	gMR5_N5BT_B9 -9.0449	gMR6_N6OC_B12 -12.4878	gMR7_N7PBP_B16 -16.2076	gMR8_N7PBP_B19 -19.3274
gLJ4_N4T_B6 -6.0000	gLJ5_N5BT_B9 -9.1039	gLJ6_N6OC_B12 -12.7121	gLJ7_N7PBP_B16 -16.5054	gLJ8_N7PBP_B19 -19.8215
gMO4_N4T_B6 -6.0000	gMO5_N5BT_B9 -9.0676	gMO6_N6OC_B12 -12.6315	gMO7_N7PBP_B16 -16.3288	gMO8_N7PBP_B19 -19.5159
gMC4_N4T_B6 -6.0000	gMC5_N5BT_B9 -9.0003	gMC6_N6OC_B12 -12.0182	gMC7_N7PBP_B16 -15.8831	gMC8_N7PBP_B19 -18.8837
gLC4_N4T_B6 -6.0000	gLC5_N5BT_B9 -9.0008	gLC6_N6OC_B12 -12.0234	gLC7_N7PBP_B16 -15.8524	gLC8_N7PBP_B19 -18.8542
				
gMR9_N5BT_B23 -23.4172	gMR10_N4T_B27 -27.4733	gMR11_N5BT_B31 -31.5219	gMR12_N7PBP_B36 -36.4003	gMR13_N13IC_B42 -42.4399
gLJ9_N5BT_B23 -24.1134	gLJ10_N4T_B27 -28.4225	gLJ11_N5BT_B31 -32.7660	gLJ12_N7PBP_B36 -37.9676	gLJ13_N13IC_B42 -44.3268
gMO9_N5BT_B23 -23.6868	gMO10_N4T_B27 -27.8529	gMO11_N5BT_B31 -32.0288	gMO12_N7PBP_B36 -37.1056	gMO13_N13IC_B42 -43.3177
				
gMC9_N5BT_B23 -22.6449	gMC10_N4T_B27 -26.1327	gMC11_N7PBP_B30 -29.5961	gMC12_N4T_B34 -33.3323	gMC13_N13IC_B42 -37.2589
				
gLC9_N5BT_B23 -22.5475	gLC10_N4T_B27 -25.9160	gLC11_N4T_B30 -29.3948	gLC12_N4T_B34 -33.1448	gLC13_N13IR_B37 -36.7369

Figura 4. LJ versus LC y MC: Transiciones entre los verdaderos clústeres globales y clústeres locales cercanos de 11 partículas.

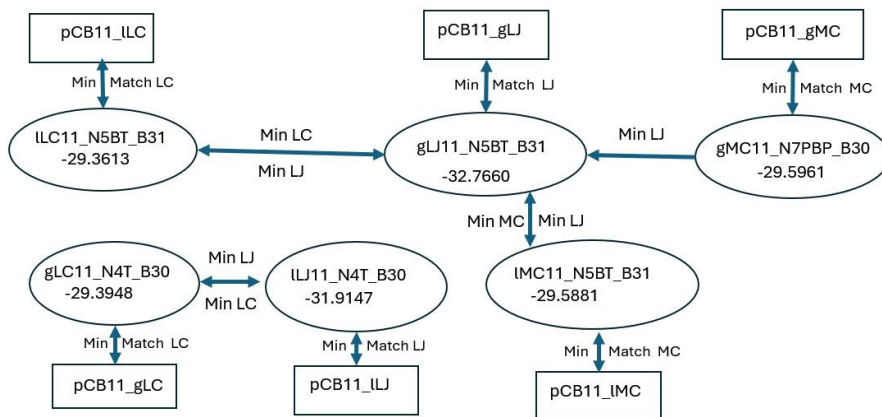


Figura 5. MO versus LC y MC: Transiciones entre los verdaderos clústeres globales y clústeres locales cercanos de 11 partículas.

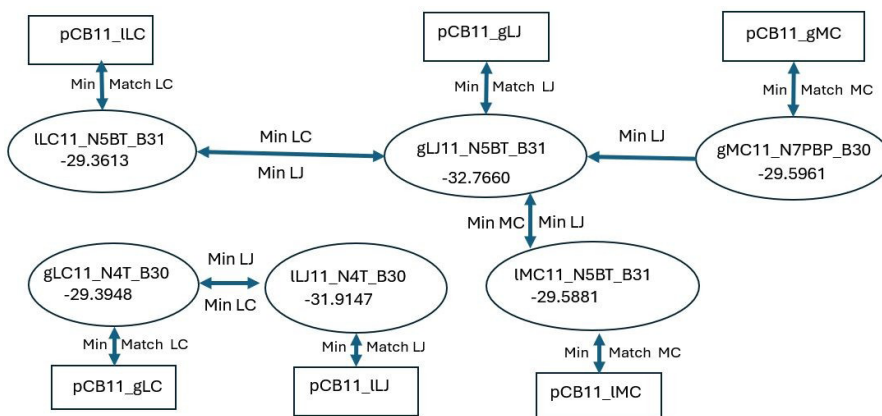
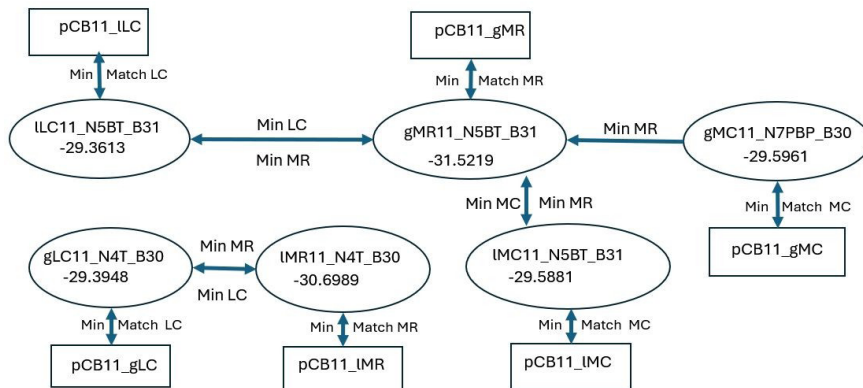
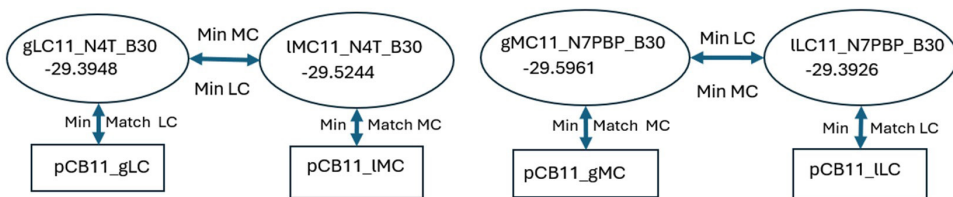


Figura 6. MR versus LC y MC: Transiciones entre los verdaderos clústeres globales y clústeres locales cercanos de 11 partículas.



Las figuras 4, 5 y 6 describen en detalle las transformaciones de los clústeres de 11 partículas bajo la minimización de los potenciales PT y su correspondientes pCB11_IPT (cuando la coincidencia fuerte es para un clúster local) y pCB11_gPT (cuando la coincidencia fuerte es respecto a un verdadero clúster global). En las figuras mencionadas los clústeres gLJ11_N5BT_B31, gMO11_N5BT_B31, gMR11_N5BT_B31 son diferentes en potencial y similares en su geometría (mismo núcleo N5BT y $|B| = 31$) se transforman mediante minimización bajo LC en el mismo clúster local ILC11_N5BT_B31 (preserva la geometría del clúster de origen). Para estos casos la minimización bajo el correspondiente LJ, Mo y MR regresa a los correspondientes verdaderos clústeres globales. Otra transición que se cumple en todos los casos es la coincidencia fuerte entre los clústeres locales y globales y la latice $CB_{1/2}$.

Figura 7. LC y MC: Transiciones entre los verdaderos clústeres globales y clústeres locales cercanos de 11 partículas.



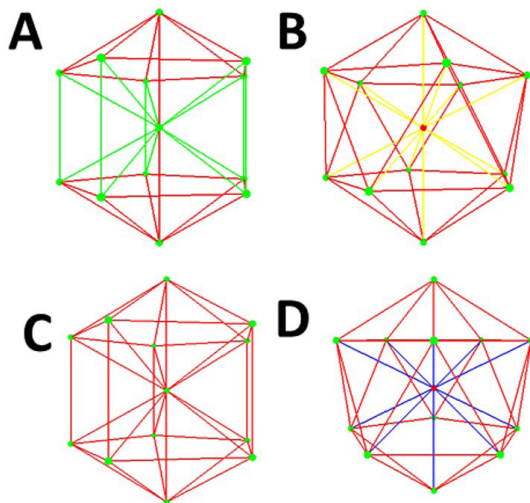
La figura 7 muestra como los verdaderos mínimos globales de LC y MC están separados. La minimización de gLC11_N4T_B30 bajo MC da el clúster mínimo local ILC11_N4T_B30 (preserva la geometría de gLC11_N4T_B30) que tiene su correspondiente pCB11_ILC y de forma similar la minimización de gMC11_N7PBP_B30 bajo LC da el mínimo local ILC11_N7PBP_B30 (preserva la geometría de gMC11_N7PBP_B30) con su correspondiente pCB11_ILC. O sea, a pesar de las similitudes de las gráficas de LC y MC las pequeñas diferencias de curvatura dan dos verdaderos mínimos globales diferentes para MC y LC. Esto también resalta la importancia de tener completa la familia BC(11) para determinar los verdaderos clústeres globales.

Para 12 partículas los verdaderos clústeres mínimos se agrupan en dos geometrías, LJ, MO y MR con núcleo N7PBP y $|B| = 36$ y los clústeres de LC y MC tiene núcleo N4T y $|B| = 34$. En este caso, LJ, MO Y MR comparten la misma geometría N5BT_B36. Mientras que LC y MC tiene la forma de N4T_B34.

Finalmente, para 13 partículas, los verdaderos clústeres tienen el mismo núcleo N13IC con LJ, MC, MO y MR mientras que LC tiene núcleo N13IR, la diferencia de las cardinalidades de B entre ellos es de 5. La figura 8, muestra las longitudes de las l_f que explican que las contribuciones del potencial de LC del verdadero óptimo global oLC13_

N13IR de $|B| = 37$, corresponde a 37 ligas de longitud 1.0 que aportan -36.6541 y se tiene -0.0828 de las diagonales por lo que el potencial total es -36.7369. Para LC, el icosaedro N13IC da el clúster oLC13_N13IC con $|B| = 42$ donde tiene 30 lf de longitud 1.03 y 12 de longitud 0.98 aportan -35.9138 y sumando -0.0175 del potencial de las diagonales se obtiene el potencial total de -35.9313 (> -36.7369) que no es menor al potencial de gLC13_N13IR. Para LJ la determinación del verdadero optimo global es porque $|B| = 42$ de N13IC es mayor a $|B| = 37$ de N13IR. En este caso para N13IR se tiene que las 37 lf aportan -36.8034 y las diagonales -4.7518 por lo que el potencial es -41.5552. Por otro lado, N13IC tiene de B una aportación de -41.0877 y la aportación de NB es -3.2391 siendo el potencial total -44.3268. Nótese que la aportación de B de N13IC (-41.0877) es menor que la aportación de B de N13IR (-36.8034) y en este caso no hay forma de que la contribución de NB de N13IR ayude a superar el potencial de gLJ13_N13IC.

Figura 8. **A.** LJ(oLJ13_N13IR) = -41.5552, $|B| = 37$: 22 lf (1.0, rojos) y 15 lf (0.98, verdes), **B.** LJ(gLJ13_N13IC) = -44.3268, $|B| = 42$: 30 lf (1.01, rojos) y 12 lf (0.96, amarillos), **C.** LC(gLC13_N13IR) = -36.7369, $|B| = 37$: 37 lf (1.0, rojos) y **D.** LC(oLC13_N13IC) = -35.9313, $|B| = 42$: 30 lf (1.03, rojos) y 12 lf (0.98, azules).



De los casos con para 11, 12 y 13 partículas donde cambia la geometría entre los verdaderos clústeres globales se destacan que $|B|$ de gran valor no garantiza la optimalidad global. Para 11 partículas, los verdaderos clústeres LC y MC tienen $|B| = 30$ menor a $|B| = 31$ de los verdaderos clústeres de LJ, MO y MR. Y como se explicó detalladamente para 13 partículas LJ, MC, MO y MR corresponden con N13IC de $|B| = 42$ mientras que LC tiene su verdadero mínimo clúster con N13IR de $|B| = 37$.

5. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

Las simulaciones numéricas abren un camino para la creación de este tipo de estructuras de forma experimental. Es bien conocida la influencia de la geometría sobre las propiedades físicas, como el color y la interacción entre moléculas.

La determinación de los clústeres globales se ha manejado para determinar los posibles candidatos de mínimo global por la carencia de propiedades matemáticas como la de primer orden que establece que el gradiente de un núcleo estable es cero y la de segundo orden de que su Hessiano es definido positivo en una vecindad apropiada, propiedades que solo se tienen para todos los potenciales y los clústeres de 2, 3 y 4 partículas. En este trabajo por primera vez se tiene una justificación teórica que limita los casos para obtener los verdaderos clústeres de mínimo potencial global bajo la minimización y la preservación del clúster mínimo local sobre los clústeres de las familias de buenos clústeres $BC(n)$ donde n es el número de partículas desde 5 hasta 13.

El núcleo N13IR aparece como un verdadero clúster de mínimo potencial global del potencial LC, lo que indica la correlación entre la forma de la gráfica de potencial y los clústeres de mínimo potencial global y sus finitas y diferentes formas geométricas de los verdaderos clústeres globales, comenzando con 11 partículas. Esto tiene consecuencias sobre el diseño de nano circuitos dado que solo se consiguen formas geométricas similares de 2 a 10 partículas. Donde solo los núcleos N4T, N6OC y N7PBP ofrecen geometría similar, simetría y estabilidad para LJ, MC, MO y MR. Los verdaderos clústeres mínimos globales de 11, 12 y 13 partículas tienen geometrías diferentes, i.e. diferente núcleo y diferente número $|B|$. El núcleo oJL13_N13IC cambio recientemente de putativo a mínimo global para el potencial de LJ, ver Barrón, 2022^a y con este trabajo se conoce que los verdaderos clústeres de mínimo global para LJ, MC, MO y MR, comparten el núcleo N13IC y $|B| = 42$ pero el verdadero clúster de LC tiene núcleo N13IR y $|B| = 37$.

Los resultados brindan una nueva perspectiva que acota la búsqueda de clústeres estables y desde el punto de vista computacional es un avance significativo en la eficiencia de la determinación de los clústeres globales ya que se tienen posibilidades finitas de clústeres para el diseño computacional y experimental de nano estructuras estables o de mínimo potencial, i.e., i.e., solo se requiere minimizar en los clústeres de las familias $BC(n)$ y seguir construyéndolas. Lo que facilitará el estudio de nuevos potenciales de Morse con variaciones del parámetro γ y de los exponentes de LJ.

6. AGRADECIMENTOS

Agradecimiento a los organizadores del área de Álgebra, Geometría y Computación Científica por la plática: La geometría de las nanoestructuras bajo diversos pozos de potencial del 23 de enero de 2024. 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).

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.

ACERCA DEL ORGANIZADOR



Ramon González Calvet (1964) es licenciado (1986) y doctor en Química Fundamental por la Universitat de Barcelona (1993). También obtuvo el máster en Matemáticas para profesores por la Universitat Autònoma de Barcelona (1995). Ganó las oposiciones a profesor de matemáticas de secundaria (1987) y fue catedrático de secundaria (2008). Actualmente está jubilado. Ha enseñado álgebra geométrica (de Clifford) a profesores en diversas escuelas de verano, de donde surgió el *Treatise of Plane Geometry through Geometric Algebra* (2007). Durante muchos años hasta el confinamiento, también formó a graduados y

profesores interinos que querían ganar las oposiciones a profesor de matemáticas de secundaria. Sus investigaciones se centran principalmente en interfaces electrificadas, álgebra geométrica, el problema de los n cuerpos, la geometría diferencial, la mecánica celeste y los relojes de sol. Su aterrizaje en el problema de los n cuerpos fue accidental. En su etapa de estudiante en la facultad de química, se dio cuenta de que el hamiltoniano electrónico del átomo de helio no podía ser deducido de ninguna manera lógica, puesto que el problema de los tres cuerpos no tenía solución general conocida. En consecuencia, se planteó y resolvió cómo expresar la energía cinética en términos de las velocidades relativas, lo que le permitió obtener las ecuaciones del movimiento clásico de los tres y n cuerpos en términos de coordenadas y aceleraciones relativas. Después, también dedujo los hamiltonianos de los correspondientes problemas cuánticos, que era su objetivo inicial. Aplicó su hamiltoniano de los tres cuerpos al estudio de los niveles de energía vibracional del dióxido de carbono, y de la energía electrónica del átomo de helio, corrigiendo los hamiltonianos dados previamente por otros autores. Después de describir analíticamente el movimiento del sistema Sol-Tierra-Luna en una serie de tres artículos, y de estudiar la dinámica y evolución del sistema solar en una serie de cinco artículos resumidos en el primer capítulo del libro *Planets, Moons, and Beyond: Unveiling the Mysteries of the Solar System* (2026), sus últimos artículos tratan sobre el billar como modelo de la adsorción de moléculas sobre una superficie, y sobre la forma de los glóbulos rojos. Su tesis doctoral sobre termodinámica de interfases electrificadas todavía permanece inédita, aunque su contenido fue parcialmente explicado en algunos artículos.

ÍNDICE ALFABÉTICO

A

Análisis Comparativo 100, 111, 157

Aprendizaje 84, 85, 86, 97, 99, 100, 101, 102, 103, 105, 109, 110, 112, 113, 114, 117, 118, 126, 127, 129, 130, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 149, 153, 156, 158, 159, 160, 161, 163, 164, 165, 166, 167, 168, 172, 173, 177, 178, 180, 183, 184, 185, 186, 187, 190, 191, 192, 193, 194, 195, 198, 202, 203, 205, 206, 208, 209, 212, 215, 216, 217, 219

Aprendizaje Basado en Proyectos 178, 183, 184, 185, 186, 187, 188, 190, 192, 193

Aprendizaje profundo 99, 100, 101, 102, 103

C

Calidad educativa 159, 206, 207, 208, 209, 213, 214, 215, 216, 217, 218, 219

Ciencias de la salud 206, 207

Coeficientes del virial 17, 23, 24, 27

Competencias 116, 118, 119, 121, 124, 128, 134, 136, 166, 176, 177, 178, 181, 183, 184, 185, 186, 187, 190, 191, 192, 206, 209, 210, 211, 212, 218

Competencias digitales 116

Competencia transversal 175, 177, 182

Contraction semigroups 1

Correlación estadística 116, 119, 121

D

Desempeño docente percibido 138, 144, 146, 149, 155, 157, 158, 160, 161

Didáctica de la matemática 129, 134

Dinámica molecular 32, 48

Dissipative operators 1

Diversidad 129, 130, 131, 132, 134, 135, 136, 143, 162

Docencia universitaria 174, 207

DUA 129, 134

E

Educación ambiental 184, 185, 186

Educación matemática inclusiva 129, 131, 132, 134, 135, 136

Educación superior 116, 117, 165, 175, 176, 183, 184, 185, 186, 191, 192, 206, 207, 210, 211, 213, 214, 215, 217, 218, 219

Electro-estimulador 67, 69, 70, 71, 72, 74, 76, 80
Electroterapia 67, 69, 72, 76, 77, 78, 79, 82, 83
Equidade educativa 129, 131
Estatística 17, 116, 119, 121, 151, 154, 165, 166, 167, 168, 169, 170, 172, 171, 173, 174
Estudantes 116, 117, 119, 121, 122, 123, 125, 126, 127, 128, 130, 131, 132, 133, 134, 135, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 148, 149, 150, 151, 152, 154, 155, 156, 157, 158, 159, 160, 161, 164, 166, 167, 168, 171, 173, 174, 175, 181, 183, 185, 186, 187, 188, 189, 190, 191, 192, 194, 196, 197, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 204, 205, 206, 208, 209, 210, 211, 212, 215, 216, 217, 218
Estudantes de medicina 194, 196, 197, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 204, 205
Estudios de ingeniería 175, 181
Ética 127, 142, 175, 176, 177, 178, 179, 180, 181, 182

F

Formação profissional 186, 207
Fossil collecting 220
Foundation Models 99, 100, 101
Fourier analysis 1, 16

G

Gas de esferas blandas 17, 28
Gas de esferas duras 17, 23, 25, 26, 30
Gráficos Vectoriales 84, 86, 87, 88, 89, 90, 95
Green River Formation 220, 221, 222

H

Habilidades investigativas 116, 119, 121, 122, 123, 124, 127
Hille-Yosida theorem 1

I

Inteligencia artificial 99, 100, 101, 102, 116, 117, 118, 119, 122, 124, 125, 127
Inteligência Artificial Generativa 99, 100
Interacción Humano Máquina 84
Isoterma del billar 17

J

Justicia social 129, 131, 133, 134, 135, 136

L

Liderazgo 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 146, 147, 149, 150, 151, 154, 155, 156, 157, 158, 159, 160, 161, 162, 163, 164, 177, 183, 185, 186, 188, 189, 190, 191, 192

M

Matemáticas 16, 44, 74, 90, 91, 129, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 149, 151, 152, 154, 156, 157, 158, 159, 160, 161, 162, 163, 164, 165, 167, 168, 169, 173, 174

Metodologías activas 184, 185, 186, 187, 189, 192

Modelos Multimodales 100

Morrison Formation 220, 228

N

Nanoquímica 32, 48

O

Odd-order differential operators 1, 16

Odontología 206, 207, 208

P

Percepción 67, 138, 140, 143, 144, 147, 148, 149, 150, 151, 152, 153, 154, 155, 156, 157, 158, 160, 161, 162, 176, 188, 189

Periodic Sobolev spaces 1, 16

Potencial de Lennard-Jones 17, 18, 28, 29

Private collections 220

Procesamiento de Lenguaje Natural 84, 88, 107, 112

Psicología 127, 165, 166, 167, 169, 173, 174

Python 84, 85, 87, 88, 89, 91, 97

Q

Química Ambiental 183, 184, 185, 187, 188, 189, 192

Química de materiales 32, 48

R

Reconocimiento de voz 84, 85, 86, 87, 88, 89, 94, 95, 96, 97, 98, 101, 102, 103, 108, 110

Redes Neuronales Convolucionales 99, 100, 101, 102, 104, 106, 113

Redes Neuronales Recurrentes 99, 100, 101, 102, 103, 106, 113

Región Ica 116, 119, 122

Responsabilidad profesional 175

Revisión sistemática 163, 194, 196, 197, 218

S

Sauriermuseum Aathal 220, 221, 225, 229, 230

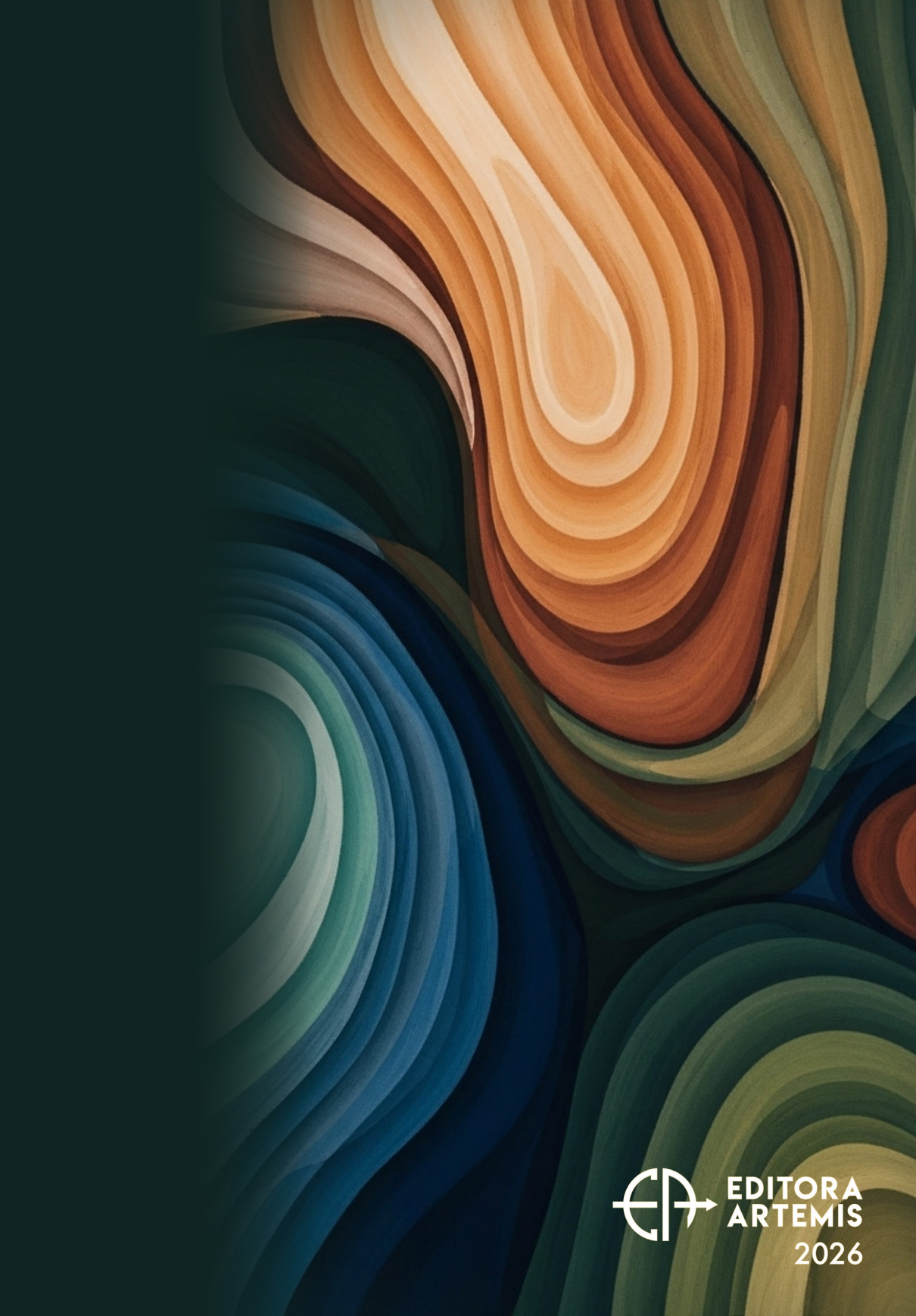
Science–policy collaboration 220

Sueño 194, 195, 196, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 204, 205

T

TENS 66, 67, 69, 83

Transformadores 99, 100, 101, 109, 111



**EDITORA
ARTEMIS**

2026