

VOLI

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



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.**

<b>Editores</b>	Antonella Carvalho de Oliveira
<b>Editora Executiva</b>	M. <sup>a</sup> Viviane Carvalho Mocellin
<b>Direção de Arte</b>	M. <sup>a</sup> Bruna Bejarano
<b>Diagramação</b>	Elisângela Abreu
<b>Organizador</b>	Prof. Dr. Ramon González Calvet
<b>Imagem da Capa</b>	sharuzzaman/123RF
<b>Bibliotecário</b>	Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422

#### Conselho Editorial

Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> 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.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Amanda Ramalho de Freitas Brito, Universidade Federal da Paraíba, Brasil  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Ana Clara Monteverde, *Universidad de Buenos Aires*, Argentina  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Ana Júlia Viamonte, Instituto Superior de Engenharia do Porto (ISEP), Portugal  
Prof. Dr. Ángel Mujica Sánchez, *Universidad Nacional del Altiplano*, Peru  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Angela Ester Mallmann Centenaro, Universidade do Estado de Mato Grosso, Brasil  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Begoña Blandón González, *Universidad de Sevilla*, Espanha  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Carmen Pimentel, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Catarina Castro, Universidade Nova de Lisboa, Portugal  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Cirila Cervera Delgado, *Universidad de Guanajuato*, México  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Cláudia Neves, Universidade Aberta de Portugal  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> 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. Leiníg 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](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](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](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](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](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](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](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](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](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](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](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](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](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](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](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](https://doi.org/10.37572/EdArt_27062610916)

**ACERCA DEL ORGANIZADOR.....231**

**ÍNDICE ALFABÉTICO..... 232**

# CAPÍTULO 4

## NUEVAS PEQUEÑAS NANOESTRUCTURAS DE MÍNIMO POTENCIAL 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, 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. Se incluyen dos potenciales cuyo valle de minimización es muy angosto comparado con los valles de potenciales similares al de Lenard Jones 12-6. Los nano vehículos predichos son estables por ser de 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 que se obtienen entre distintas capas de envolturas y distintos tipos de núcleo. **PALABRAS-CLAVE:** química de materiales; nanoquímica; dinámica molecular.

### NEW SMALL 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. Two potentials are included whose minimization valley is very narrow compared to the valleys of potentials similar to that of Lenard Jones 12-6. 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 novel geometric shapes that are obtained between different layers of shells 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). Se agregan  $MC(d)=\text{Morse}(14, d)$  y  $LC(d) = \frac{1}{d^{32}} - \frac{2}{d^{16}}$ . 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).

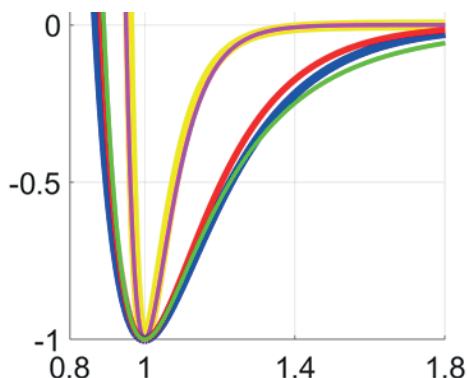
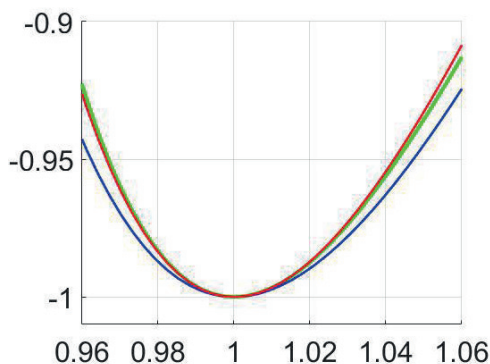


Figura 2. Valle de atracción de los potenciales de MR (rojo, angosto), LJ (verde, referencia) y MO (azul, ancho).



Por medio de un desarrollo de Taylor de segundo orden alrededor de la distancia óptima 1, las funciones de potencial de 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. Estas aproximaciones indican que las partículas están fuertemente ligadas alrededor de la distancia óptima 1. La baja fuerza de las interacciones en la zona asintótica ( $d > 1.4$ ) predice la existencia de grupos de partículas a distancia mayor a 1 en la zona asintótica ( $d \in [1.4, \infty)$ ), o sea, se pueden crear envolturas, 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.

En el presente trabajo los análisis de sensibilidad se centran en los potenciales LJ, MO y MR, mientras que los potenciales LC y MC presentan nuevas estructuras con núcleos especiales.

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 de 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, 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.

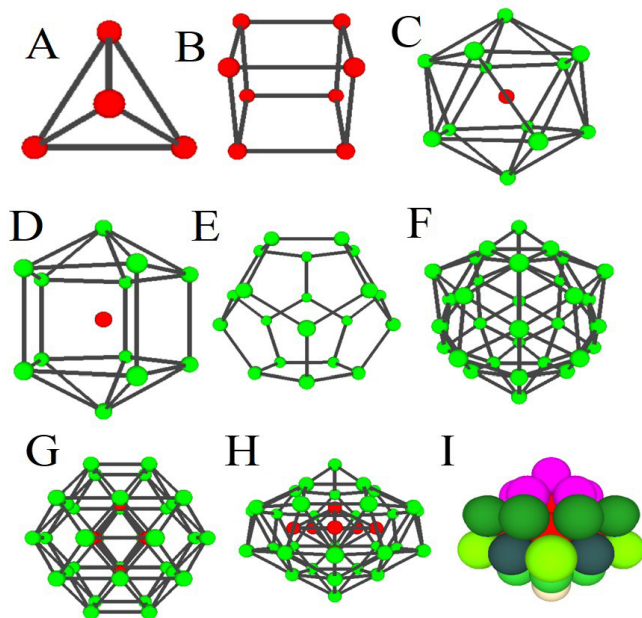


Figura 4. **A.** Envoltura redondeada de 614 partículas de la lattice IC, **B.** Nano-vehículo de 627 partículas con oLJ13\_N13IC al centro.

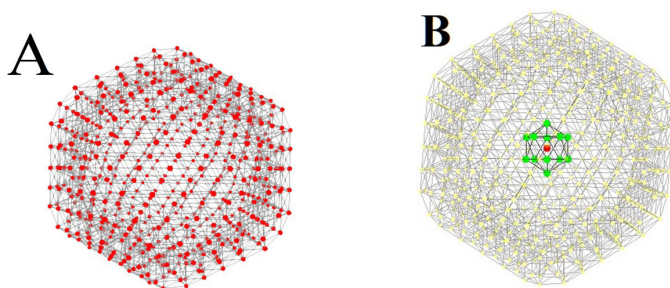
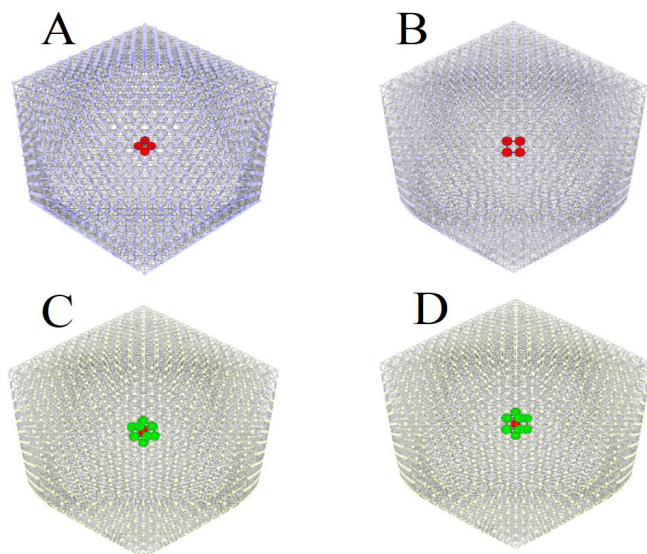


Figura 5. **A.** Nano vehículo 2658, oLJ4 en envoltura IC de 2654 partículas, **B.** Nano vehículo 3664, N8CB en envoltura IC de 3656 partículas, **C.** Nano vehículo 2667, oLJ13 en envoltura IC de 2654 partículas, **D.** Nano vehículo 3669, N13IR en envoltura IC de 3656 partículas.



### 3.2. ENVOLTURAS

Las envolturas son regiones convexas de capas de partículas de latices con distancia mínima optimizada. La figura 9 muestra las envolturas de la latice 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 o escalar, i.e., se seleccionan las partículas a partir del centro por medio de una esfera de un radio apropiado (ver figura 4.A.).

### 3.3. CLÚSTERES PARA LC Y MC.

Con una versión actualizada del algoritmo del artículo de Barrón-Romero, et al. 1999 (que se publicará próximamente) se estudiaron los clústeres de los potenciales

de LC, LJ, MC, MO y MR para determinar los posibles clústeres de mínimo potencial desde 4 a 2063 partículas. Los resultados de los clústeres de LJ coinciden y en algunos casos superan a los publicados en *The Cambridge Cluster Database, Lennard-Jones clusters*, Wales et al. 2026. Una tabla actualizada de los posibles potenciales mínimos globales de LC, LJ, MC, MO y MR se tiene en la página: [https://academicos.azc.uam.mx/cbr/OptClusters/comMRLJMO\\_01.htm](https://academicos.azc.uam.mx/cbr/OptClusters/comMRLJMO_01.htm). Además, todos los posibles clústeres mínimos globales publicados en la página anterior satisfacen la condición de los estimadores de frontera, ver Barron 2023.

#### 4. RESULTADOS Y DISCUSION

Se tienen experimentos con una variedad de envolturas, para este trabajo se presentan las que se derivan de la latice 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 2. 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.

La tabla 3. 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 4 muestra resultados similares a los de la tabla 3. 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 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.

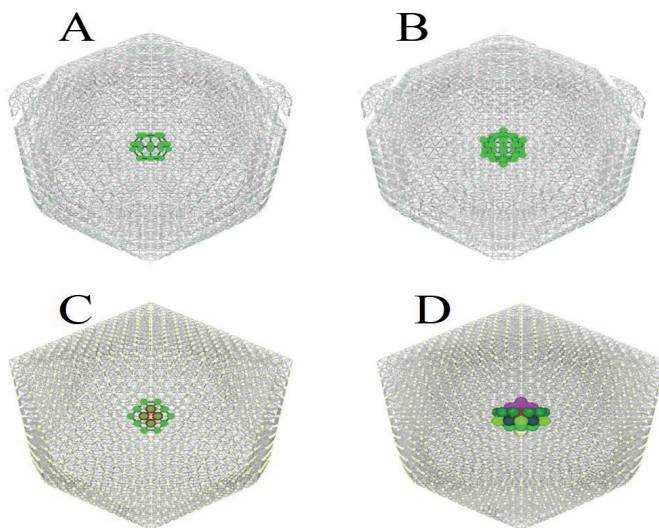
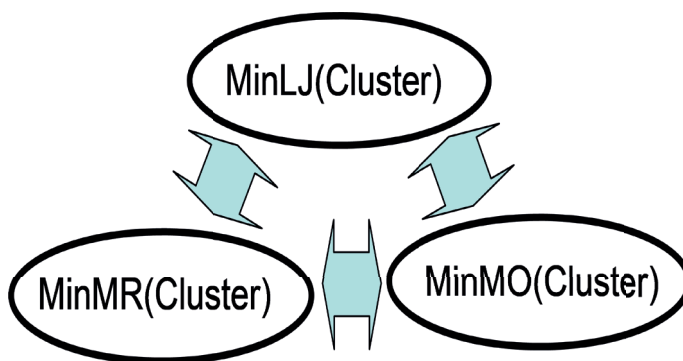


Figura 7. Estabilidad a los cambios de potencial significa minimizar un clúster con los diferentes potenciales sin que cambie su forma.



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 lattice IC de 3434 partículas.

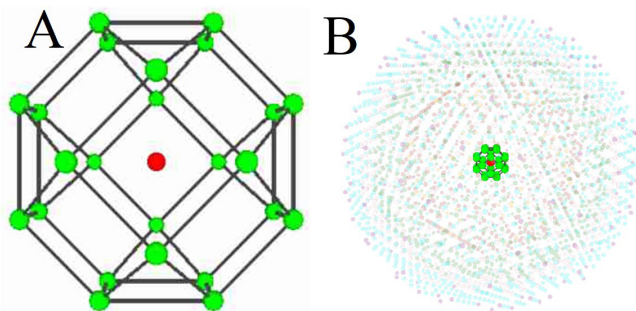


Figura 9. Envolturas de la lattice IC de A) 614, B) 2654 y C) 3656 partículas.

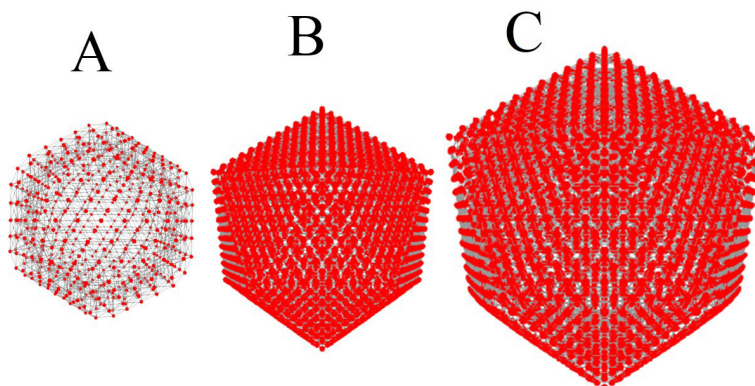
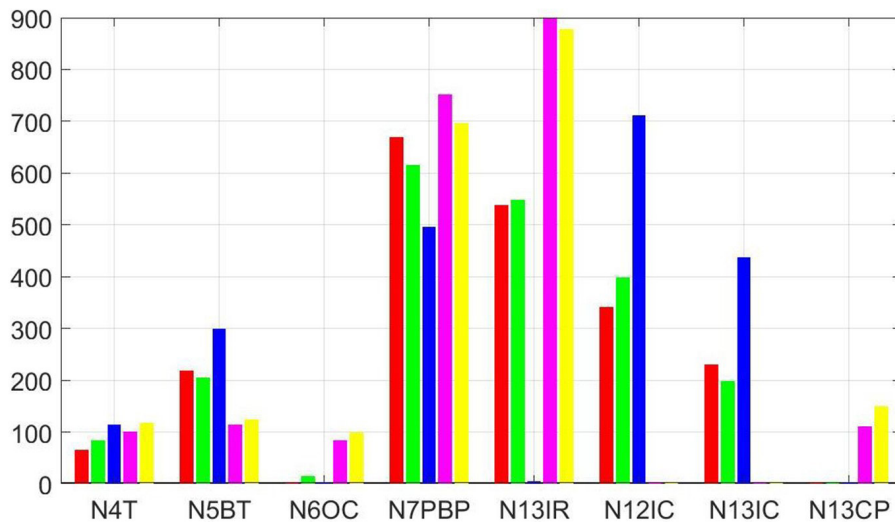
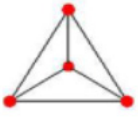

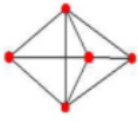
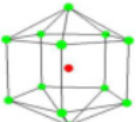



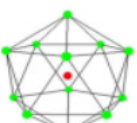


Figura 10. Histograma de la distribución de los posibles clústeres globales por tipo de núcleo de 4 a 2063 partículas.



## 4.1. NUEVOS CLÚSTERES PARA LC Y MC

Tabla 1. Distribución por núcleo de los posibles clústeres de mínimo potencial LC, LJ, MC, MO y MR para clústeres de 4 a 2063 partículas.

Núcleo	Figura	#	MR	%	Núcleo	Figura	#	MR	%
			LJ	MO				MC	LC
N4T		64	3.11%	N7PBP		669	32.48%		
		83	4.03%			615	29.85%		
		113	5.49%			495	24.03%		
		100	4.85%			751	36.46%		
		117	5.68%			695	33.74%		
N5BT		218	10.6%	N13IR		537	26.1%		
		204	9.90%			548	26.6%		
		299	14.51%			4	0.19%		
		114	5.53%			901	43.74%		
		124	6.02%			878	42.62%		
N6OC		1	0.05%	N12IC		341	16.55%		
		14	0.68%			398	19.32%		
		2	0.10%			710	34.47%		
		83	4.03%			0	0.00%		
		98	4.76%			0	0.00%		
N13CP		0	0.00%	N13IC		230	11.17%		
		0	0.00%			198	9.61%		
		0	0.00%			437	21.21%		
		110	5.34%			1	0.05%		
		148	7.18%			0	0.00%		
MR		283	13.74%	MR		1777	86.26%		
LJ		301	14.61%	LJ		1759	85.39%		
MO		414	20.10%	MO		1646	79.90%		
MC		407	19.76%	MC		1653	80.24%		
LC		487	50.19%	LC		1573	76.36%		

La tabla 1 muestra las poblaciones de clústeres de los potenciales LC, LJ, MC, MO y MR de 4 a 2063 partículas. Como se aprecia en la figura 10, de especial atención se tienen los 83 y 98 clústeres de MC y LC de núcleo N6OC que superan los 14 de los clústeres de LJ. Otro caso es el de núcleo N13CP que no tiene posibles clústeres de mínimo global para LJ, MO y MR pero si para LC y MC. El histograma de la figura 10 muestra que la curvatura angosta de la gráfica de LC y MC favorecen clústeres con núcleo N6OC, N7PBP, N13IR y N13CP.

Ejemplos de clústeres de LC y MC para los núcleos N6OC y N13CP se muestran en la figura 11 y 12. La figura 13 muestra el verdadero clúster de 13 partículas gLJ13\_N13IC

para LJ (Ver Barron 2022<sup>a</sup>) y los posibles clústeres mínimos globales de MC, MO y MR comparten el núcleo N13IC. Destaca que el posible optimó global de LC tenga núcleo N13IR.

Figura 11. Clústeres de LC y MC de núcleo N6OC. **A.** LC(oLC124\_N6OC) = -558:0177 y MC(oMC124\_N6OC) = -557:4216. **B.** LC(oLC287\_N6OC) = -1397:4047 y MC(oMC287\_N6OC) = -1395:7960. **C.** LC(oLC760\_N6OC) = -3932:9474 y MC(oMC760\_N6OC) = -3932:1448.

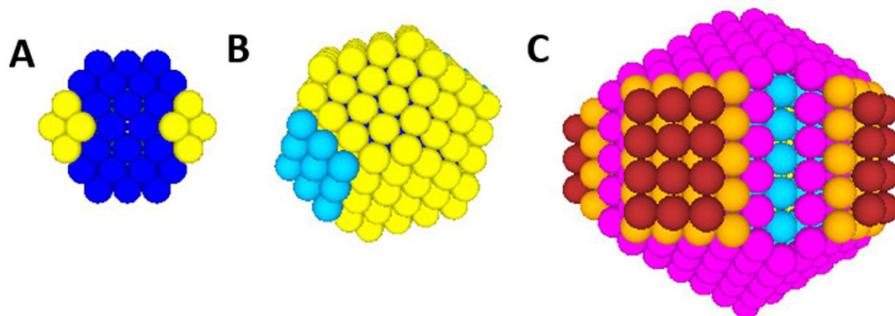


Figura 12. Clústeres de LC y MC de núcleo N13CP. **A.** LC(oLC86\_N13CP) = -370:2641 y MC(oMC86\_N13CP) = -369:8908. **B.** LC(oLC162\_N13CP) = -749:7364 y MC(oMC162\_N13CP) = -748:9229. **C.** LC(oLC546\_N13CP) = -2773:8974 y MC(oMC546\_N13CP) = -2773:4229.

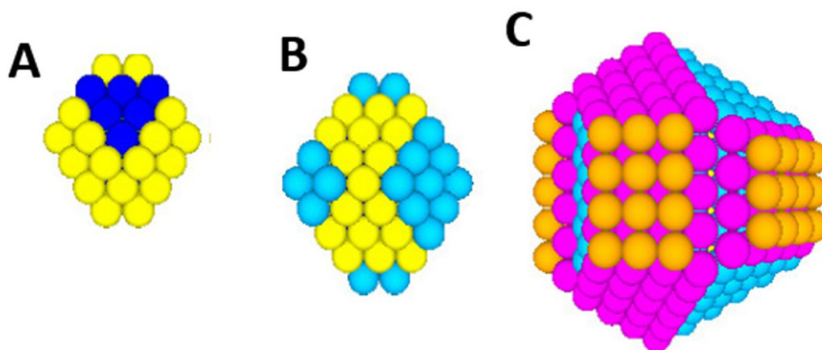
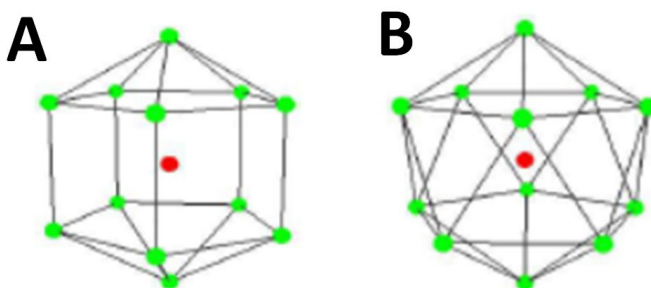


Figura 13. Clústeres de 13 partículas. **A.** LC(oLC13\_N13IR) = -36:7369. **B.** LJ(gLJ13\_N13IC) = -44:3268, MC(oMC13\_N13IC) = -37:2589, MO(oMO13\_N13IC) = -43:3177 y MR(oMR13\_N13IC) = -42:4399. Los de LJ, MC, MO y MR tienen núcleo N13IC pero el de LC tiene núcleo N13IR.



## 5. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

Las simulaciones numéricas abren un camino para la creación de este tipo de estructuras de forma experimental. Se muestran nuevos clústeres de núcleo N13CP y N6OC para los potenciales LC y MC que no se tienen para los potenciales LJ, MO y MR. Lograr estabilidad para la minimización y la variación de potenciales se muestra en la tabla 4 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), por ejemplo, la temperatura. El valle de la región mínima de potencial LC muestra lo sensible que es el clúster de 13 partículas a cambios, su valles del mínimo es muy angosto y tiene como posible clúster de mínimo potencial a oLC13\_N13IR que no comparte el núcleo de LJ, MC, MO y MR que es N13IC. Tal sensibilidad e inestabilidad se mostró dentro de las envolturas, cuando en la minimización se cambia la función de potencial, N13IR 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 N20BaIP (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.

La investigación futura incluirá potenciales más diversos tanto de LJ, como de Morse porque amplían las geometrías de las configuraciones de clústeres y brindan un nuevo camino para su creación experimental. Es de interés práctico y teórico el conocer los posibles clústeres globales para entender los resultados, obstáculos y limitaciones experimentales. Por ejemplo, las condiciones de optimalidad de primero y segundo orden clásicas muestran que los clústeres de 2, 3 y 4 partículas son únicos independientemente del tipo de potencial. El potencial MR solo tiene un clúster de núcleo N6OC (ver tabla 1) y su gráfica de potencial solo es ligeramente diferente de la del potencial LJ como se muestra en las figuras 1 y 2. En este trabajo la lista de núcleos de los posibles clústeres de mínimo potencial global aumento con el núcleo N13CP, por lo que es válido investigar otros potenciales para ampliar el entendimiento de las nano estructuras.

Tabla 2. Envoltura redondeada de latice 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			
oLJ4	-3464.5573	-3161.5262	-3026.9701
	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
Estable			
N8CB	X	-3170.4340	-3035.1504
		X	X
		X	X
Inestable			
oLJ13	-3505.5432	-3198.8640	-3063.4143
	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
Estable			
N13IR	X	-3195.8978	-3060.3357
		X	X
		X	X
Inestable			
N20BaIP	X	X	X
Inestable			
N32EstP	X	X	X
	Inestable		
oLJ38	-3647.0086	-3319.5074	-3178.5605
	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
Estable			
oLJ39	X	X	X
	Inestable		

Tabla 3. Envoltura de latice IC de 2654 partículas, 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			

	-14906.8185	-13629.9967	-13081.3791
N8CB	X	X	X
	X	X	✓
	Inestable		
	-14935.9207	-13658.4138	-13109.6402
oLJ13	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
	Estable		
	-14933.1494	-13655.4457	-13106.5610
N13IR	X oLJ13	X oLJ13	X oLJ13
	X oLJ13	X oLJ13	X oLJ13
	Inestable		
	-23906.0392	-21424.2778	-20383.1031
N20BaIP	X		X
	X	X	X
	Inestable		
	X	X	X
N32EstP	X	X	X
	Inestable		
	✓	✓	✓
oLJ38	✓	✓	✓
	Estable		
	✓	✓	✓
oLJ39	X	X	X
	Inestable		

Tabla 4. 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		
	-23873.6788	-21395.3864	-20355.9404
oLJ4	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
	Estable		

	-23883.0357	-21404.2870	-20364.1192
N8CB	X	✓	X
	X	✓	✓
	Inestable		
	-23912.1856	-21432.7041	-20392.3802
oLJ13	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
	Estable		
	-23909.4148	-21429.7360	-20389.3011
N13IR	X oLJ13	X oLJ13	X oLJ13
	X oLJ13	X oLJ13	X oLJ13
	Inestable		
	-23906.0392	-21424.2778	-20383.1031
N20BalP	X	X	X
	X	X	X
	Inestable		
	-23971.9812	-21486.4488	-20444.3553
N32EstP	X	X	X
	X	X	X
	Inestable		
	-24042.3418	-21552.7954	-20507.3473
oLJ38	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
	Estable		
	-24048.4744	-21559.1035	-20513.4224
oLJ39	✓	✓	✓
	✓	✓	✓
	Estable		

## 5. 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: CBO06-22, Acuerdo: 671.4.3.2.4).

## REFERENCIAS

- Barrón-Romero, C. (2023). Estimadores de Frontera para los supuestos clústeres consecutivos de óptimo potencial global. *Avances en Ciencias e Ingeniería*, Vol. 14(2).
- 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 (2026). 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

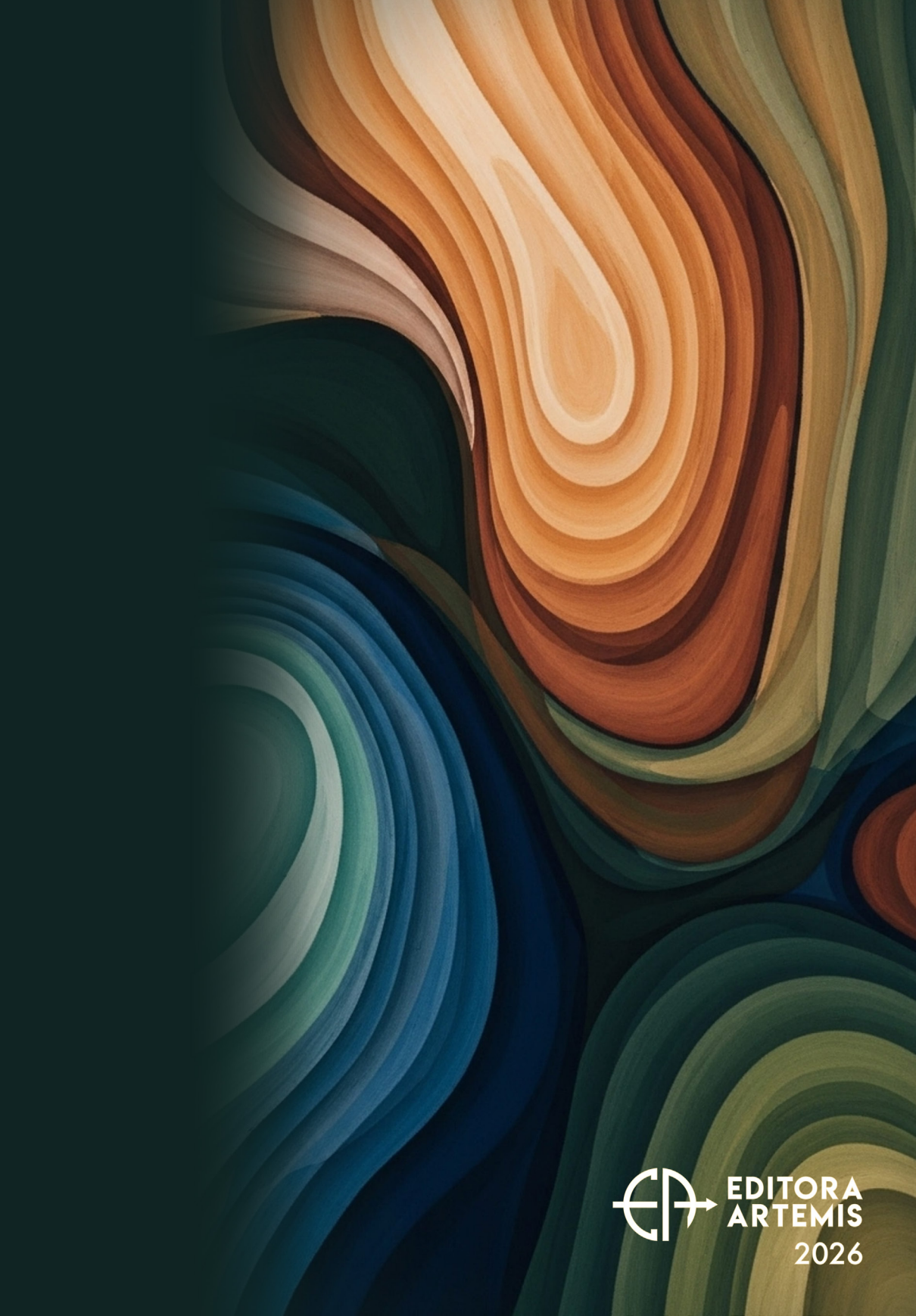
Science–policy collaboration 220

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**