



EL SABER DE MIS HIJOS
HARA MI GRANDEZA

UNIVERSIDAD DE SONORA

DIVISION DE CIENCIAS EXACTAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA



**PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ESTABILIDAD EN
CUMULOS DE ORO, PLATA Y COBRE.**



TESIS

**Que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para
obtener el grado de:**

LICENCIADO EN FÍSICA

Presenta:

JOHANN OMAR ZAZUETA SANCHEZ



EL SABER DE MIS HIJOS
HARA MI GRANDEZA
BIBLIOTECA DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess



EL SABER DE MIS HIJOS
HARA MI GRANDEZA
**BIBLIOTECA DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES**

Índice

Introducción	1
CAPITULO 1: Antecedentes.	4
CAPITULO 2: Algoritmos Genéticos.	14
2.1 Algoritmo Genético para Cúmulos.	15
2.2 Potencial de Gupta.	16
2.3 Funcionamiento del algoritmo genético para cúmulos de Birmingham.	18
CAPITULO 3: Análisis y Resultados.	25
3.1 Cúmulos puros de Cobre, Plata y Oro.	26
3.1.1 Cobre.	27
3.1.2 Plata.	30
3.1.3 Oro.	33
3.2 Estabilidad.	38
3.3 Factor de Estructura.	40
CONCLUSIONES.	49



EL SABER DE MIS HIJOS
HARA MI GRANDEZA
BIBLIOTECA DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

ANEXOS.	53
Anexo 1.	54
Anexo 2.	57
APENDICES.	59
Apéndice A.	60
Referencias.	62

Índice de Figuras

Figura 1. Imagen obtenida con un microscopio túnel de barrido, que muestra los átomos individuales dispuestos de forma uniforme en la superficie de un cristal de germanio. Los colores de la imagen son falsos, creados por computadora.

Pág. 5

Figura 2. Fotografía tomada de la tabla periódica para ilustrar la ubicación de los cúmulos de elementos a estudiar.

Pág. 7

Figura 3. En su estado sólido, la estructura cristalina de cobre es fcc (Cúbica Centrada en las Caras).

Pág. 8

Figura 4. En su estado sólido, la estructura cristalina de plata es fcc (Cúbica Centrada en las Caras).

Pág. 9

Figura 5. En su estado sólido, la estructura cristalina de oro es fcc (Cúbica Centrada en las Caras).

Pág. 9

Figura 6. Diagrama de flujo representando el funcionamiento del algoritmo genético para cúmulos de Birmingham.

Pág. 19

Figura 7. Simulación de dos cúmulos padres, sometidos a un acoplamiento de cruce o apareamiento (*Crossover*). Es preciso aclarar que el corte que se les hace a los padres puede ser en cualquier dirección o inclinación.

Pág. 21

Figura 8. Un algoritmo determinista intentaría encontrar la mejor solución a este laberinto pero fracasaría ya que siempre elegiría un mismo camino. En cambio, un algoritmo genético es estocástico ya que, aunque siempre partiría del mismo punto escogería diferentes rutas, todas aleatoriamente, para después compararlas y escoger la mejor solución al problema. Pág. 23

Figura 9. Ejemplo de una superficie explorada por el algoritmo genético en su búsqueda del mínimo global; es decir; del cúmulo más estable. Pág. 24

Figura 10. Dos vistas diferentes para las diferentes estructuras más estables encontradas para cúmulos de Cu. Se muestra la distancia promedio en Å entre pares de átomos. Las estructuras que pueden ser observadas son: Icosaedro (13), Poli-icosaedro (19, 55, 100) y Cubo-octaedro (38). Pág. 28

Figura 11. Dos vistas diferentes para las diferentes estructuras más estables encontradas para cúmulos de Ag; excepto el Ag₃₈ que es inestable. Se muestra la distancia promedio en Å entre pares de átomos. Las estructuras que pueden ser observadas son: Icosaedro (13), Poli-icosaedro (19, 55, 100) y amorfa (38). Pág. 31

Figura 12. Dos vistas diferentes para las diferentes estructuras más estables encontradas para cúmulos de Au, excepto Au₁₉ y Au₅₅ que son inestables. En la gráfica se muestra la distancia promedio en Å entre pares de átomos. La estructura que puede ser observada es el Icosaedro (13); las demás estructuras son amorfas. Pág. 34

Figura 13. Gráfica de la energía de enlace promedio por número de átomos, para el cobre. Es posible observar que conforme $n \rightarrow \infty$ la energía de enlace tiende al valor experimental del metal sólido; que en el caso del cobre es 3.544 electrón volts.

Pág. 36

Figura 14. Gráfica de la energía de enlace promedio por número de átomos, para la plata. Es posible observar que conforme $n \rightarrow \infty$ la energía de enlace tiende al valor experimental del metal sólido; que en el caso del plata es 2.960 electrón volts.

Pág. 37

Figura 15. Gráfica de la energía de enlace promedio por número de átomos, para el oro. Es posible observar que conforme $n \rightarrow \infty$ la energía de enlace tiende al valor experimental del metal sólido; que en el caso del oro es 3.779 electrón volts.

Pág. 37

Figura 16. Gráfica de la estabilidad para cúmulos de cobre. Se encuentran encerrados en un círculo aquellos cúmulos cuyas estructuras se han publicado en este trabajo. Es necesario aclarar que en esta gráfica no se encuentra la estabilidad del cúmulo de $n=100$ debido que no se calculo el cúmulo de 101 átomos.

Pág. 38

Figura 17. Gráfica de la estabilidad para cúmulos de plata. Se encuentran encerrados en un círculo aquellos cúmulos cuyas estructuras se han publicado en este trabajo. Es necesario aclarar que en esta gráfica no se encuentra la estabilidad del cúmulo de $n=100$ debido que no se calculo el cúmulo de 101 átomos.

Pág. 39

Figura 18. Gráfica de la estabilidad para cúmulos de plata. Se encuentran encerrados en un círculo aquellos cúmulos cuyas estructuras se han publicado en este trabajo. Es necesario aclarar que en esta gráfica no se encuentra la estabilidad del cúmulo de $n=100$ debido que no se calculó el cúmulo de 101 átomos. Pág. 39

Figuras 19-33. Gráfica del factor de estructura para cúmulos de oro, plata y cobre con $n= 13, 19, 38, 55$ y 100 átomos. Págs. 41-48

Índice de Tablas

Tabla 1. Configuración electrónica de los metales nobles. Pág. 7

Tabla 2. Parámetros del potencial de Gupta utilizados por el algoritmo genético; estos son obtenidos de forma experimental del metal sólido. Pág. 18

Tabla 3. Archivos de entrada para cada uno de los cúmulos estudiados, n es el número de átomos, que va desde 2 -100. Pág. 26

Tabla 4. Tabla de mínima energía potencial total encontrada para cúmulos puros átomos de cobre. La energía es dada en electrón volt. Pág. 29

Tabla 5. Tabla de mínima energía potencial total encontrada para cúmulos puros átomos de plata. La energía es dada en electrón volt. Pág. 32

Tabla 6. Tabla de mínima energía potencial total encontrada para cúmulos puros átomos de oro. La energía es dada en electrón volt. Pág. 35

Introducción

Los cúmulos, son agregados de átomos (o moléculas), que contienen de entre dos y algunos miles de átomos. El estudio de estos ha ido creciendo notablemente desde 1980. Esto se debe al interés fundamental de estudiar completamente una nueva área de la física que permita ligar la física atómica con el estado sólido y que muestre algunas analogías a la física nuclear. Pero su estudio también se realiza por el interés que hay debido a su potencial tecnológico en áreas como la catálisis, fotografía, computación, etc.

Los cúmulos se consideran un estado de agregación considerado como un puente entre el átomo y el sólido, no es gas ni líquido ni sólido. Son átomos aglomerados por fuerzas que determinan las propiedades del cúmulo. Al incrementarse el número de átomos aglomerados las propiedades pasan de ser molecular a parecerse a un sólido. Los primeros cúmulos fueron observados durante la investigación en Rice University por Richard Smalley ⁽¹⁾ por el cual recibió el premio Nóbel, al descubrir nuevas formas del elemento carbón, en el cual los átomos formaban arreglos de cáscara cerrada, al cual llamo fullerenos. Los cúmulos pueden encontrarse desde el hollín de chimeneas y cámaras de combustión interna en motores e incluso hasta en el espacio exterior.

Los cúmulos poseen una gran cantidad de aplicaciones potenciales, una de ellas son los nanotubos cuyas propiedades pueden ser tanto eléctricas como mecánicas, proveen una amplia gama de aplicaciones. Entre ellas macro aplicaciones como grupos de nanotubos que funjan como cables de altas propiedades mecánicas. Estos cables podrían utilizarse en construcción de puentes en suspensión, construcciones resistentes a impactos de terremotos o de elementos naturales. Recientes estudios de las propiedades de las nanomoléculas sugieren la posibilidad de utilizarlos como superconductores a temperaturas de

alrededor de 20 Kelvin. Debido a su flexibilidad es posible utilizarlos como absorbentes de golpes. Se pueden utilizar para transmitir calor en una dirección ya que tienen una gran conductividad térmica a lo largo del tubo. Se trata de poder hacer nanoalambres que revolucionen la industria de las computadoras al crear procesadores y difusores de calor mucho más pequeños que los actuales. Al envolverlos con boro-nitratos es posible aislarlos del ambiente.

Además de las importantes aplicaciones en los diversos campos de la ciencia y las ingenierías, el estudio de los cúmulos atómicos también es interesante desde el punto de vista de la ciencia básica dado que estos sistemas son por sí mismos, laboratorios que nos permiten conocer la manera en que evolucionan las propiedades de los agregados atómicos hasta obtener las del metal masivo. Así, se han desarrollado metodologías experimentales y teóricas para la investigación de sus diversas propiedades físicas y químicas, de manera que en la actualidad es posible decir que la previsión de Richard Feynmann ^(2,4,5) se ha hecho realidad al menos en cuanto a la obtención de los nanosistemas como lo dice en su trabajo "There's Plenty of Room at the Bottom (hay mucho lugar en el fondo)" ⁽³³⁾. Queda pendiente la aplicación en todo su potencial, tal como el mismo Feynmann lo predijo.

El propósito de esta tesis es hacer un estudio de las diversas estructura de mínima energía que adoptan los cúmulos de átomos de metales nobles (Au, Ag y Cu) con el número de agregación, la estabilidad de estas estructuras y sus propiedades estructurales a través del factor de estructura. Se comparan los resultados teóricos de este trabajo con los de otros autores y también con información experimental existente. Para generar las estructuras de los cúmulos se emplea una estrategia de búsqueda global de mínimos conocida como algoritmos genéticos.

El capítulo uno consiste en un repaso sobre la estructura del átomo y algoritmos genéticos. El capítulo dos contiene una descripción y un análisis del algoritmo genético empleado para la formación de cúmulos en sus estructuras de energía potencial mínima. En el capítulo tres se discute la estabilidad y el factor de estructura para los diferentes tipos de átomos estudiados. Finalmente en el capítulo cuatro se comparan los resultados obtenidos con resultados experimentales y otros resultados teóricos.

CAPITULO 1

ANTECEDENTES

En este capítulo estudiaremos y analizaremos las bases necesarias para el estudio de cúmulos, empezando por conocer al átomo y algunas de sus propiedades. Hasta llegar a comprender el uso de algoritmos genéticos.

El átomo (Figura 1), la unidad más pequeña posible de un elemento químico. En la filosofía de la antigua Grecia, la palabra “átomo” se empleaba para referirse a la parte de materia más pequeña que podía concebirse. Esa “partícula fundamental”, por emplear el término moderno para ese concepto, se consideraba indestructible. De hecho, átomo significa en griego “no divisible”. A lo largo de los siglos, el tamaño y la naturaleza del átomo sólo fueron objeto de especulaciones, por lo que su conocimiento avanzó muy lentamente ⁽³⁰⁾.

Con la llegada de la ciencia experimental en los siglos XVI y XVII, los avances en la teoría atómica se hicieron más rápidos. Los químicos se dieron cuenta muy pronto de que todos los líquidos, gases y sólidos se pueden descomponer en sus constituyentes últimos, o elementos.



Figura 1. Imagen obtenida con un microscopio túnel de barrido, que muestra los átomos individuales dispuestos de forma uniforme en la superficie de un cristal de germanio. Los colores de la imagen son falsos, creados por computadora.

En los sólidos, los átomos están densamente empaquetados, lo que lleva a la existencia de fuerzas de interacción muy intensas y numerosos efectos relacionados con este tipo de fuerzas que no se observan en los gases, donde las moléculas actúan en gran medida de forma independiente. Los efectos de interacción son responsables de las propiedades mecánicas, térmicas, eléctricas, magnéticas y ópticas de los sólidos, un campo que resulta difícil de tratar desde el punto de vista teórico, aunque se han realizado muchos progresos.

El conocimiento de la estructura electrónica nos permite interpretar las semejanzas y diferencias entre las propiedades químicas de los elementos. La Plata, el Cobre y el Oro, son elementos de transición que presentan características diferentes de los demás elementos que conforman la familia. También son conocidos como metales nobles.

Los metales nobles son un grupo de metales caracterizados por ser muy inertes químicamente, es decir, que no reaccionan químicamente o que reaccionan muy poco con otros compuestos químicos. Esto les da una gran utilidad para muchos fines tecnológicos o para joyería. Aunque los más conocidos son el oro, la plata y el cobre, también forman parte de este grupo el mercurio, el platino, el iridio, el rodio y el paladio.

Se debe tener muy en cuenta al estudiar cúmulos de átomos la configuración electrónica, que es el modo en el cual los electrones están ordenados en el átomo y determinan las propiedades químicas del mismo. Como los electrones son fermiones están sujetos al principio de exclusión de Pauli, que dice que dos fermiones no pueden estar en el mismo estado cuántico a la vez. Por lo tanto, en el momento en que un estado es ocupado por un electrón, el siguiente electrón debe ocupar un estado cuántico diferente. En la Tabla 1 se muestran las configuraciones electrónicas de los metales nobles para una comparación.

Número Atómico	Nombre	Símbolo	Configuración Electrónica
29	Cobre	Cu	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹
45	Rodio	Rh	[Kr] 4d ⁸ 5s ¹
46	Paladio	Pd	[Kr] 4d ¹⁰
47	Plata	Ag	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ¹
77	Iridio	Ir	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ²
78	Platino	Pt	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ¹
79	Oro	Au	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹
80	Mercurio	Hg	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ²

Tabla 1. Configuración electrónica de los metales nobles.

En este trabajo de tesis, estudiaremos los átomos de Oro, Plata y Cobre, que también pertenecen al grupo de Metales Nobles (Figura 2). A continuación se dan algunas características de estos elementos.

28	29	30
Ni	Cu	Zn
Níquel	Cobre	Cinc
46	47	48
Pd	Ag	Cd
Paladio	Plata	Cadmio
78	79	80
Pt	Au	Hg
	Oro	

Figura 2

Cobre (Figura 3), de símbolo Cu, es uno de los metales de mayor uso, de apariencia metálica y color pardo rojizo. El cobre es uno de los elementos de transición de la tabla periódica, y su número atómico es 29. El cobre tiene una gran variedad de aplicaciones a causa de sus ventajosas propiedades, como son

su elevada conductividad del calor y electricidad, la resistencia a la corrosión, así como su maleabilidad y ductilidad, además de su belleza. Debido a su extraordinaria conductividad, sólo superada por la plata, el uso más extendido del cobre se da en la industria eléctrica.

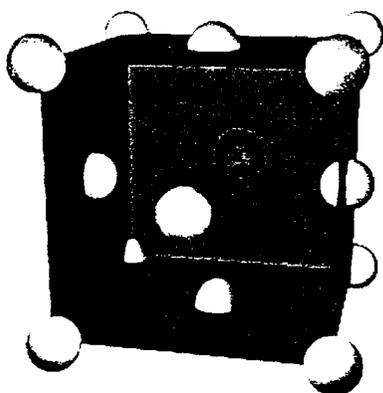


Figura 3. En su estado sólido, la estructura cristalina de cobre es fcc.
(Cúbica Centrada en las Caras)

Plata (Figura 4), de símbolo Ag, es un elemento metálico blanco y brillante que conduce el calor y la electricidad mejor que ningún otro metal. Es uno de los elementos de transición del sistema periódico. Su número atómico es 47. Desde el punto de vista químico, la plata no es muy activa. Es insoluble en ácidos y álcalis diluidos, pero se disuelve en ácido nítrico o sulfúrico concentrado, y no reacciona con oxígeno o agua a temperaturas ordinarias.

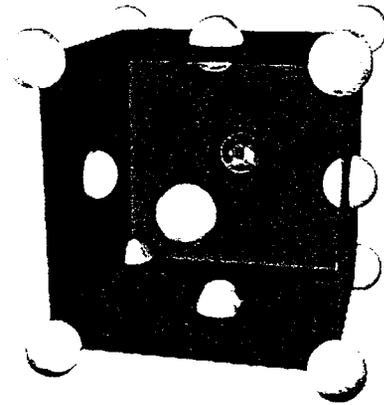


Figura 4. En su estado sólido, la estructura cristalina de la plata es fcc.
(Cúbica Centrada en las Caras)

Oro (Figura 5), de símbolo Au es un elemento metálico, denso y blando, de aspecto amarillo brillante. El oro es uno de los elementos de transición del sistema periódico. Su número atómico es 79. Es un metal muy inactivo. No le afectan el aire, la humedad, ni la mayoría de los disolventes. Sólo es soluble en agua de cloro, agua regia o una mezcla de agua y cianuro de potasio. Los cloruros y cianuros son compuestos importantes del oro.

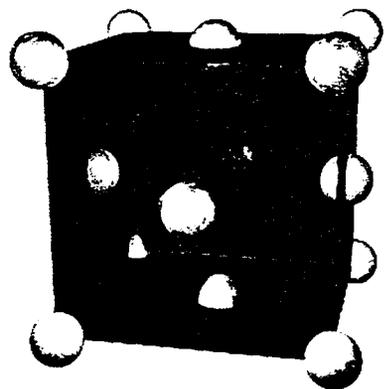


Figura 5. En su estado sólido, la estructura cristalina del oro es fcc.
(Cúbica Centrada en las Caras)

Los cúmulos son agregados de hasta millones de átomos o moléculas, que podrían consistir de átomos o moléculas iguales o de más de un tipo. Es posible formarse por algunos elementos de la tabla periódica y se pueden encontrar en diversos ambientes como lo son: chimeneas, fotografías, atmósfera, etc. Los cúmulos muestran muchas características interesantes, una de ellas es la comparación entre el número de átomos que se encuentran en la superficie y el número de átomos en el interior. Para diferentes tipos de cúmulos de hasta 12 átomos, estos se encuentran en la superficie (si tomamos como sistema de referencia el átomo que se encuentra en el centro del cúmulo, la superficie será todos aquellos átomos que se encuentren a su alrededor). Conforme crece el cúmulo, el número de átomos relativo que se encuentran en la superficie se escala hasta un aproximado de $4N^{-1/3}$ en donde N es el número de átomos (el cálculo de este término se puede observar en el apéndice A). Incluso en un cúmulo tan grande como 10^5 átomos, casi un 10% de ellos se encuentran en la superficie. Lo cual nos lleva a clasificarlos de la siguiente manera:

1. Micro cúmulos: Contienen de entre 3 y 10-13 átomos. Para su estudio se aplican conceptos y métodos de la física molecular.
2. Cúmulos pequeños: Contienen de entre 10-13 hasta 100 átomos. Se dejan de aplicar conceptos moleculares, ya que presentan una isomería geométrica.
3. Cúmulos grandes: Contienen de 100 a 1000 átomos. Es posible observar una transición hacia las propiedades del estado sólido.
4. Nanocristales o pequeñas partículas: Contienen por lo menos 1000 átomos. Estos cuerpos presentan algunas propiedades del estado sólido.

Tradicionalmente la física de estado sólido describe a un cristal como una extensión ordenada periódica de los átomos con una cierta simetría -Las más

comunes son bcc, fcc o hcp- este tipo de orden no se encuentra normalmente en los cúmulos, aunque la geometría que mayor se presenta en los cúmulos que se estudiaron es de tipo poli-icosaédrica

En este trabajo, se emplea el uso de un algoritmo genético ⁽¹²⁾, con el cual intentamos encontrar el cúmulo de más baja energía potencial para átomos puros de Oro, Plata y Cobre; analizando cúmulos desde 2 hasta 100 átomos.

Los algoritmos genéticos son una técnica de computación basada en los principios de la evolución biológica de Darwin.

Expuesto concisamente, un algoritmo genético es una técnica de programación que imita a la evolución biológica como estrategia para resolver problemas. Dado un problema específico a resolver, la entrada del algoritmo genético es un conjunto de soluciones potenciales a ese problema, codificadas de alguna manera, y una función de aptitud que permite evaluar cuantitativamente a cada candidato. Estos candidatos pueden ser soluciones que ya se sabe que funcionan, con el objetivo de que el algoritmo genético las mejore, pero se suelen generar aleatoriamente.

Luego, el algoritmo genético evalúa cada candidato de acuerdo con una función de aptitud. En un conjunto de candidatos generados aleatoriamente, la mayoría no funcionarán en absoluto, y serán eliminadas. Sin embargo, por puro azar, unos pocos pueden ser prometedores, pueden mostrar actividad, aunque sólo sea actividad débil e imperfecta, hacia la solución del problema.

Estos candidatos prometedores se conservan y se les permite reproducirse. Se realizan múltiples copias de ellos, pero las copias no son perfectas; se introducen cambios aleatorios durante el proceso de copia.

Luego, esta descendencia digital prosigue con la siguiente generación, formando un nuevo conjunto de soluciones candidatas, y son sometidas a una ronda de evaluación de aptitud. Los candidatos que han empeorado o no han mejorado con los cambios en su código son eliminados de nuevo; pero, de nuevo, por puro azar, las variaciones aleatorias introducidas en la población pueden haber mejorado a algunos individuos, convirtiéndolos en mejores soluciones del problema, más completas o más eficientes.

De nuevo, se seleccionan y copian estos individuos vencedores hacia la siguiente generación con cambios aleatorios, y el proceso se repite. Las expectativas son que la aptitud media de la población se incrementará en cada ronda y, por tanto, repitiendo este proceso cientos o miles de rondas, pueden descubrirse soluciones muy buenas del problema.

Aunque a algunos les puede parecer asombroso y poco intuitivo, los algoritmos genéticos han demostrado ser una estrategia enormemente poderosa y exitosa para resolver problemas, demostrando de manera espectacular el poder de los principios evolutivos. Se han utilizado algoritmos genéticos en una amplia variedad de campos para desarrollar soluciones a problemas tan difíciles o más difíciles que los abordados por los diseñadores humanos. Además, las soluciones que consiguen son a menudo más eficientes, más elegantes o más complejas que un ingeniero humano produciría.

En algunos casos, los algoritmos genéticos han producido soluciones que dejan perplejos a los programadores que escribieron los algoritmos en primera instancia.

La importancia del uso de algoritmos genéticos ⁽⁶⁾ en este estudio de cúmulos se da a partir de que se dificulta su estudio por medio de métodos más tradicionales como son la dinámica molecular o simulación Monte-Carlo. Es por

esta razón, que el uso de algoritmos genéticos se ha hecho cada vez más popular al buscar la optimización de la geometría de un cúmulo.

Los pioneros en el uso de algoritmos genéticos para optimizar la geometría de cúmulos son Hertke ⁽¹⁰⁾, Xiao y Williams ⁽¹¹⁾ y su amplia aceptación como técnica de optimización, tiene que ver con el hecho de ser una estrategia de búsqueda global, es decir, que explora extensivamente una hipersuperficie de energía potencial hasta encontrar el mínimo de más baja energía.

CAPITULO 2

ALGORITMOS GENÉTICOS

Hasta este punto hemos obtenido las bases necesarias para poder estudiar cúmulos. Ahora será necesario profundizar y comprender aun más la herramienta utilizada para realizar dichos estudios.

2.1 Algoritmo Genético para Cúmulos

El algoritmo genético ⁽⁴⁾ es una técnica de búsqueda, basada en los principios de evolución natural. Emplea operadores que son análogos al proceso de selección natural, mutación y cruce genético. El algoritmo genético puede ser aplicado a cualquier problema en el cual las variables a optimizar pueden ser codificados para formar una cadena, donde ésta representa una solución prueba del problema, entonces los operados intercambian información entre cadenas para obtener nuevas soluciones.

Para dar paso al estudio de cualquier cúmulo, primero tendremos que familiarizarnos con el programa de algoritmo genético. Todo comienza por el archivo de entrada, que es un simple archivo de texto que es utilizado por el algoritmo genético cuyos parámetros pueden ser dados o escritos en cualquier orden; ya sea separados por espacios o por renglones, como se muestra a continuación:

```
gupta_Au
natoms=22
ngen=10
nclust=10
seed=5
term=5
file=Au22
```

En la muestra, primero especificamos el tipo de potencial a utilizar, en este proyecto de tesis hemos empleado el potencial de Gupta (gupta_Au), cuyos parámetros están escritos en el archivo **gupta_Au.in**. Posteriormente especificamos el numero de átomos en el cúmulo (natoms=22) recordando que este tiene un rango de 2 hasta 150 átomos. Después señalamos el número de generaciones (ngen=10) o evoluciones que tendrán los cúmulos generados, este

deberá ser un número entero positivo. Lo siguiente será especificar el número de cúmulos a generar ($nclust=10$), teniendo en cuenta que el número de cúmulos más el número de descendencia no exceda 100. El número de descendencia se calcula como:

$$descendencia = (0.8)(nclust) \quad (1)$$

Luego damos una semilla ($seed=5$) que nos sirve para generar un número aleatorio; usando diferentes semillas le pedimos al algoritmo genético que utilice diferentes puntos de partida. Después como una forma de seguridad, le especificamos al algoritmo genético que de por terminada la búsqueda si después de n generaciones no ha habido cambios en el cúmulo ($term=5$), en este punto habremos encontrado el cúmulo de menor energía. Y por último le decimos el nombre del archivo que deberá generar con los resultados ($file=Au22$), la extensión es $.xyz$ que es un archivo de datos que guarda las posiciones de cada uno de los átomos en el cúmulo.

2.2 Potencial de Gupta

El Potencial de Gupta ⁽²⁶⁾ nace a partir de que se muestra que los potenciales interatómicos del tipo: Morse, Lennard-Jones, etc; arrojan por su naturaleza, una expansión entre la separación de las capas internas y las capas de la superficie. Entonces, usando un simple procedimiento para el cálculo de la relajación de la superficie metálica se ha demostrado que el modelo de enlace fuerte de Friedel para metales de transición, arroja contracciones para las superficies (100), (110) y (111) de un metal fcc.

Este Potencial se basa en una aproximación a segundos momentos de la densidad de estados de un hamiltoniano de amarre fuerte. El potencial de Gupta ⁽⁸⁾ tiene una forma funcional similar al potencial de Sutton-Chen solo que se utilizan funciones exponenciales en vez de potencias. Su forma analítica es ⁽¹⁷⁾:

$$V = \frac{U_n}{2} \sum_{i=1}^n V_i \quad (2)$$

$$V_i = A \sum_{j(\neq i)=1}^n \exp[-p(r_{ij}/r_{0n} - 1)] - \left(\xi^2 \sum_{j(\neq i)=1}^n \exp[-2q(r_{ij}/r_{0n} - 1)] \right)^{1/2} \quad (3)$$

El primer término de la Ecuación (3) representa la repulsión de Born-Mayer y el segundo término la energía cohesiva de n-cuerpos del enlace metálico. El efecto de n cuerpos es típico de todos los sistemas metálicos, por lo que cualquier potencial que intente modelarlos debe incorporarlo.

Los parámetros p y q dependen del tipo de átomo que se estudia. Los valores de A se obtienen de minimizar la energía cohesiva de la estructura fcc. La Tabla 2 muestra los valores utilizados en esta investigación, haciendo notar que r_{0n} y U_n son parámetros que dependen del número de átomos del cúmulo; en donde r_{0n} es la distancia del vecino cercano. En esta parte de la investigación r_{0n} y U_n tomaron el valor de 1.00.

Átomo	a	P	q	ξ
Cu	0.0855	10.960	2.278	1.224
Ag	0.1028	10.928	3.139	1.178
Au	0.2061	10.229	4.036	1.790

Tabla 2. Parámetros del potencial de Gupta utilizados por el algoritmo genético; estos son obtenidos de forma experimental del metal sólido.

Más adelante utilizaremos los resultados que arroja este potencial para conocer más propiedades de los cúmulos.

2.3 Funcionamiento del algoritmo genético para cúmulos de Birmingham

En la figura 6 podemos observar un esquema del funcionamiento del algoritmo genético. Primero se genera una población inicial al azar, normalmente entre 10 y 30 cúmulos, en donde las coordenadas (x, y, z) de cada átomo es generada al azar en un rango de 0 a $N^{1/3}$, este rango nos representa un esfera con la cual aseguramos que los átomos generados interaccionen entre si (el cálculo de este término se puede observar en el apéndice A); después se minimiza la energía potencial del cúmulo en función de sus coordenadas (formando lo que llamaremos una población cero).

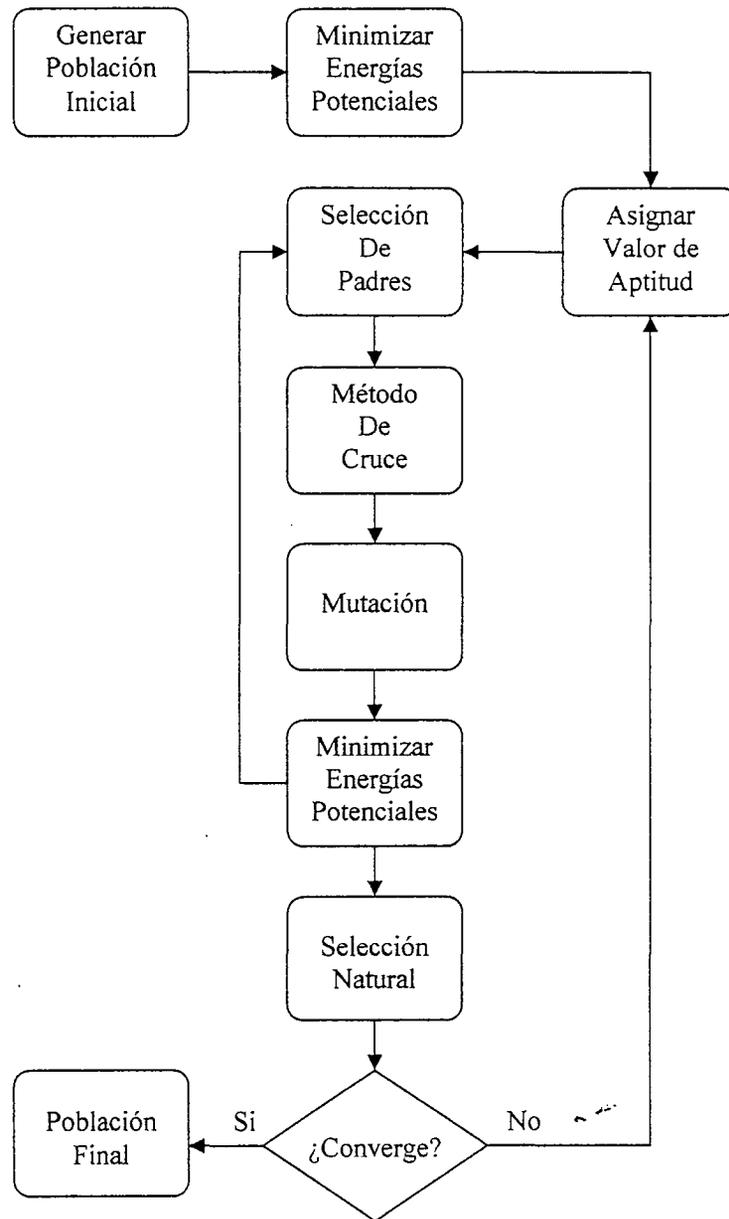


Figura 6. Diagrama de flujo representando el funcionamiento del algoritmo genético para cúmulos de Birmingham.

Una vez generada la población inicial se minimiza su energía potencial y se le asigna un valor de aptitud (f_i) que se basa en la energía potencial total del cúmulo, tal que para un cúmulo de baja energía se le asigna una aptitud alta y para un cúmulo de alta energía se le asigna una aptitud baja. En esta investigación, se utilizó la siguiente forma de f_i :

$$f_i = 0.5 \times [1 - \tanh(2\rho_i - 1)] \quad (4)$$

y el escalamiento de la aptitud es alcanzado introduciendo la cantidad adimensional ρ_i :

$$\rho_i = \frac{E_{\min} - E_i}{E_{\max} - E_{\min}} \quad (5)$$

En donde E_{\min} y E_{\max} son los valores de la energía más baja y más alta de la población.

Ahora hemos llegado a una parte importante, ya que generaremos una nueva población tomando un par de cúmulos (que llamaremos padres) de la población cero; esto lo hacemos empleando el método de la ruleta. Primero un número r es generado aleatoriamente entre 0 y 1, luego un cúmulo es seleccionado al azar de la población cero, este cúmulo será aceptado como padre solo si cumple con el requisito de que su aptitud (f_i) sea mayor que el número r . el segundo padre será seleccionado de la misma manera.

Pero en caso de que el cúmulo no cumpla con el requisito entonces se regresa y el proceso se repite, de esta forma aseguramos que los cúmulos padres seleccionados sean de baja energía para así poder acoplarlos y obtener otro cúmulo con sus características estructurales. Aunque un cúmulo en particular si

puede ser seleccionado más de una vez para ser padre, este no podrá ser seleccionado dos veces para formar parte de la misma pareja.

Una vez obtenida la pareja de padres se someten a un acoplamiento de cruce (*Crossover*) (Figura 7). Los padres son cortados y separados en dos posiciones generadas aleatoriamente. Dos porciones del descendiente vienen del primer padre y las porciones restantes del segundo padre. El acoplamiento continúa hasta tener un número determinado de descendientes, el número de acoplamientos normalmente es el 80% de la población.

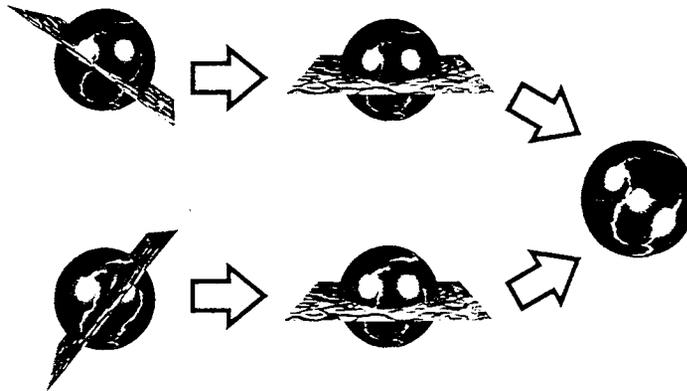


Figura 7. Simulación de dos cúmulos padres, sometidos a un acoplamiento de cruce o apareamiento (*Crossover*). Es preciso aclarar que el corte que se les hace a los padres puede ser en cualquier dirección o inclinación.

Con el fin de obtener una mayor diversidad en la población nueva, se introduce un operador de mutación, el cual solo se aplica a cúmulos recién creados antes de someterse a una minimización de energía. Cada cúmulo recién creado tiene una misma probabilidad (P_{mut}) de ser mutado. En esta investigación la mutación consiste en reemplazar por completo el cúmulo creado con uno totalmente nuevo generado al azar.

El siguiente y último paso, consiste en que el algoritmo genético tiene el trabajo de generar la siguiente población de cúmulos, para ello se comparan las energías potenciales de la población cero con la población de descendientes y mutantes; de estos se selecciona a aquellos cúmulos que posean la energía más baja, lográndose así una nueva generación “élite” de cúmulos. Esta selección es análoga a la selección natural en la evolución biológica.

Este proceso se repite por un número específico de generaciones (ngen), hasta obtener un cúmulo final, que es el de más baja energía.

¿Que es lo que hace a un Algoritmo Genético el mejor Método de Búsqueda?

El principal motivo por el cual el método de algoritmos genéticos es la mejor opción, es que un algoritmo genético es un algoritmo estocástico no determinista.

Esto es fácil observarlo si tomamos de ejemplo un laberinto, supongamos que estudiamos un problema cuya solución se encuentra dentro de la figura 8; Si tomamos un algoritmo convencional para buscar la solución, lo que observaríamos es una búsqueda de una manera clara y bien definida que puede ser predecible para encontrar una posible solución mas no la adecuada.

En cambio un algoritmo genético buscaría y analizaría toda una variedad de soluciones para después tomar la más apropiada.

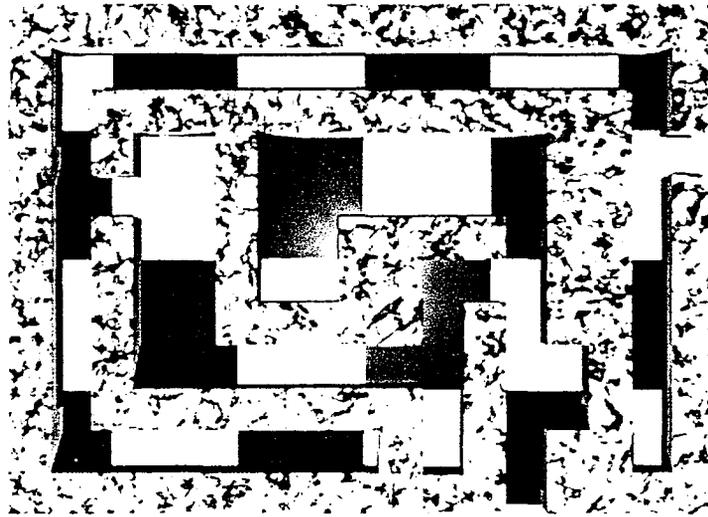


Figura 8. Un algoritmo determinista intentaría encontrar la mejor solución a este laberinto pero fracasaría ya que siempre elegiría un mismo camino. En cambio, un algoritmo genético es estocástico ya que, aunque siempre partiría del mismo punto escogería diferentes rutas, todas aleatoriamente, para después compararlas y escoger la mejor solución al problema.

Si las soluciones del problema que estudiamos se encuentran en una superficie como la de la figura 9, muy pocos métodos tendrían éxito; ya que un algoritmo como: Hill-Climbing, Random Directions, etc, se verían vencidos por el primer mínimo local, ya que siempre empezaría en el mismo punto y tomaría el mismo camino una y otra vez. En cambio, un algoritmo genético, no se dejaría engañar por un mínimo local, esto lo logra ya que aunque todas las búsquedas comienzan en el mismo punto, sus trayectorias de búsqueda son totalmente generadas al azar y sufren mutaciones que contienen información de la trayectoria anterior.

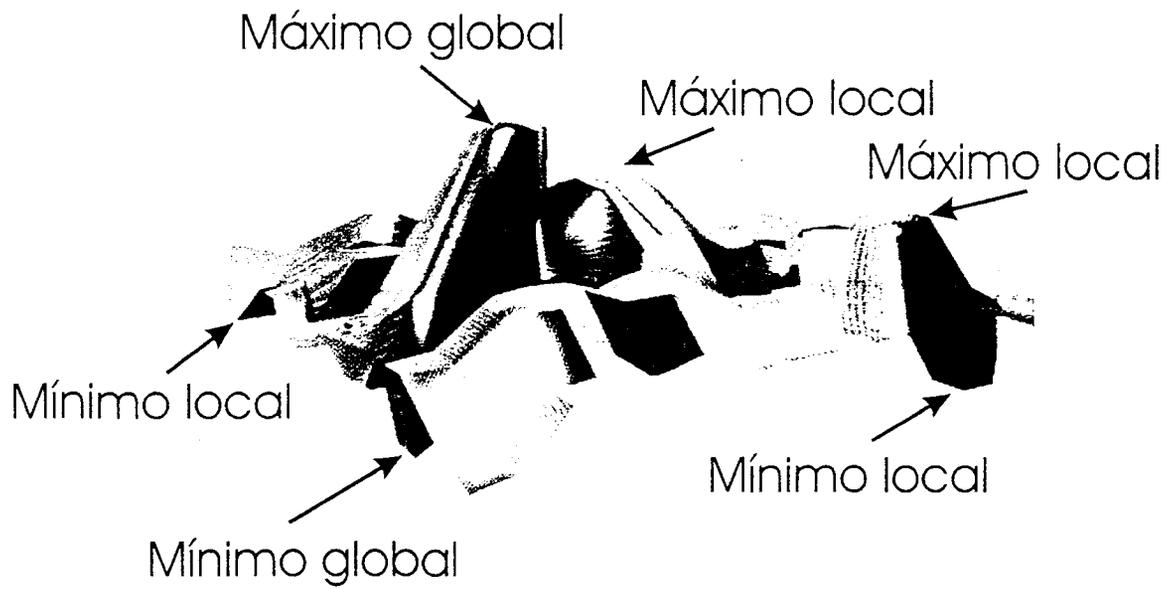


Figura 9. Ejemplo de una superficie explorada por el algoritmo genético en su búsqueda del mínimo global; es decir; del cúmulo más estable.



EL SABER DE MIS HIJOS
HARA MI GRANDEZA
BIBLIOTECA DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

CAPITULO 3

ANÁLISIS Y RESULTADOS

Ya que hemos comprendido el funcionamiento de la herramienta utilizada para el estudio de cúmulos; es hora de ponerla en práctica. Haciendo uso de esta herramienta analizaremos cúmulos puros de oro, plata cobre, posteriormente obtendremos su energía de enlace, esto para poder conocer su estabilidad relativa y a partir de allí tomar los cúmulos más estables y calcular su factor de estructura.

3.1 Cúmulos puros de Cobre, Plata y Oro

Para realizar estos cálculos, empleamos el algoritmo genético de Birmingham usando los parámetros de la tabla 3. El tipo de mutación utilizado es por reemplazo.

<pre>gupta_Cu natoms=n ngen=300 nclust=50 seed=50 term=5 file=Cu(n)</pre>	<pre>gupta_Ag natoms=n ngen=300 nclust=50 seed=50 term=5 file=Ag(n)</pre>	<pre>gupta_Au natoms=n ngen=300 nclust=50 seed=50 term=5 file=Au(n)</pre>
a)	b)	c)

Tabla 3. Archivos de entrada para cada uno de los cúmulos estudiados, n es el número de átomos, que va desde 2 -100.

Una vez que alimentamos el algoritmo genético, este encuentra al cúmulo de más baja energía potencial. A continuación se muestran los resultados obtenidos para cada uno de los metales estudiados, teniendo en cuenta que solo mostramos las estructuras con n=13, 19, 38, 55 y 100 átomos y las comparamos entre si.

3.1.1 Cobre

En la figura 10 podemos observar las estructuras obtenidas para cúmulos de Cu. En la tabla 4 se muestran los resultados de los cúmulos de más baja energía con 2 - 100 átomos. Es posible observar que los cúmulos de cobre presentan una geometría altamente regular, debido a la naturaleza de las fuerzas atractivas de largo alcance en el potencial de Gupta para el Cu. Las estructuras que describe este potencial se basan principalmente en el icosaedro; aunque es posible observar que para el cúmulo de $n=38$ presenta una estructura cristalina. Estos resultados pueden ser comparados con los obtenidos por Johnston ⁽¹²⁾ usando el potencial de Gupta, y por Wilson ^(23,24) usando el potencial de n-cuerpos de Murrell-Mottram.

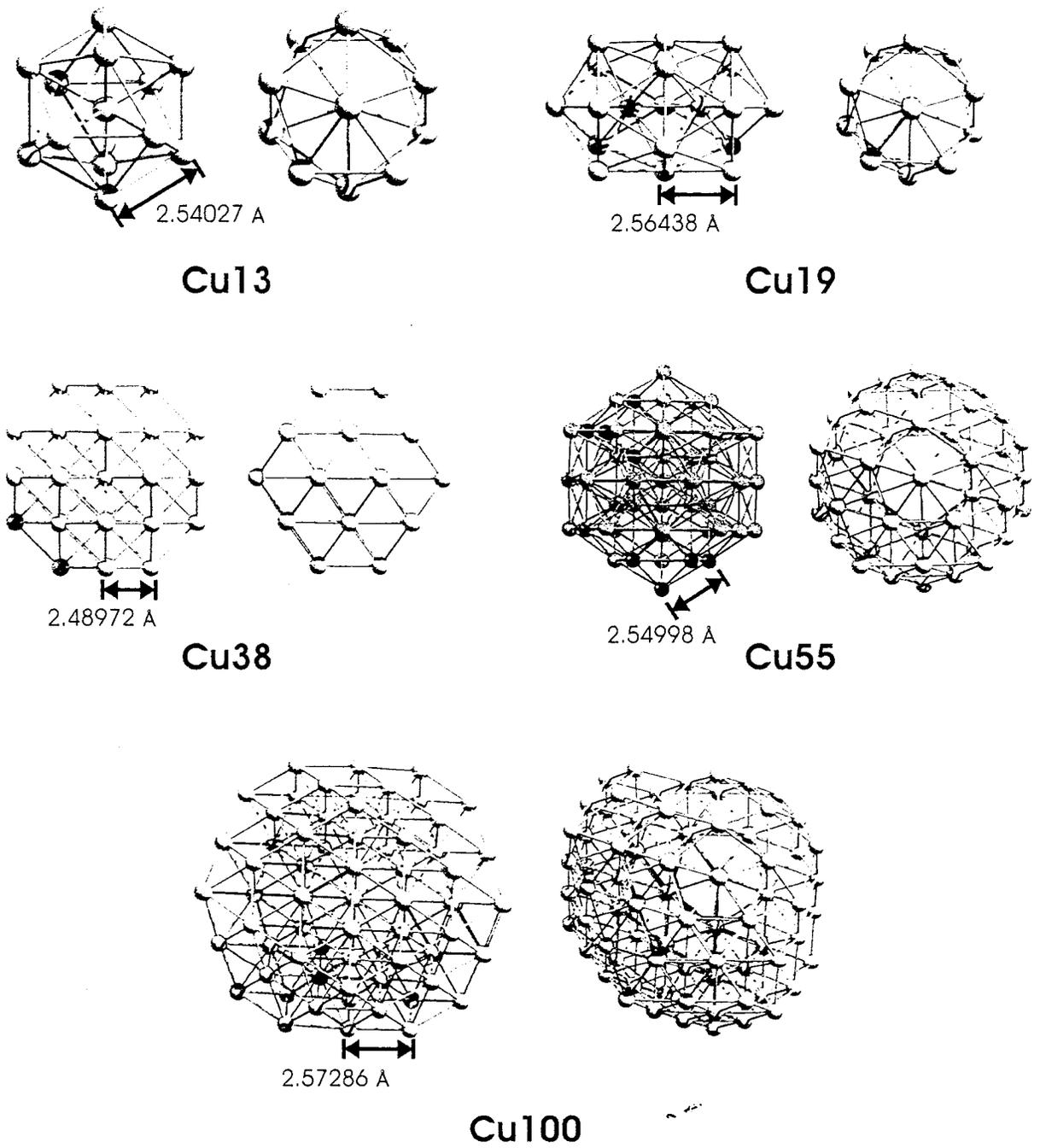


Figura 10. Dos vistas diferentes para las diferentes estructuras más estables encontradas para cúmulos de Cu. Se muestra la distancia promedio en Å entre pares de átomos. Las estructuras que pueden ser observadas son: Icosaedro (13), Poli-icosaedro (19, 55, 100) y Cubo-octaedro (38).

N	Cu E(N)	N	Cu E(N)	N	Cu E(N)	N	Cu E(N)
2	-2.58151	27	-74.981474	52	-153.124573	77	-231.753291
3	-5.000203	28	-78.157439	53	-156.488425	78	-234.6794
4	-7.742308	29	-81.048961	54	-159.851387	79	-238.092182
5	-10.377192	30	-84.012583	55	-163.213173	80	-241.324963
6	-13.237663	31	-87.041581	56	-165.882139	81	-244.556696
7	-15.959394	32	-90.273074	57	-168.724022	82	-247.77475
8	-18.632566	33	-93.297977	58	-171.959325	83	-250.991463
9	-21.430666	34	-96.291701	59	-174.97927	84	-254.040069
10	-24.300289	35	-99.336863	60	-178.168375	85	-257.323125
11	-27.154276	36	-102.501833	61	-181.37307	86	-260.413488
12	-30.277969	37	-105.597938	62	-184.326625	87	-263.270128
13	-33.746311	38	-108.967591	63	-187.517016	88	-267.070416
14	-36.26423	39	-112.088461	64	-190.719833	89	-270.424406
15	-39.156871	40	-115.095462	65	-193.658842	90	-273.642462
16	-42.008419	41	-118.006708	66	-196.867252	91	-276.85861
17	-44.863249	42	-121.127216	67	-200.02349	92	-280.072825
18	-47.851302	43	-124.378418	68	-203.153414	93	-283.126219
19	-51.254009	44	-127.334985	69	-206.424481	94	-286.34611
20	-54.06147	45	-130.570215	70	-209.761638	95	-289.562384
21	-56.877228	46	-133.943533	71	-213.094399	96	-292.731068
22	-59.829155	47	-136.894474	72	-215.99232	97	-296.011291
23	-63.13821	48	-140.110695	73	-219.04642	98	-299.332757
24	-65.936807	49	-143.483489	74	-222.350926	99	-302.72444
25	-68.949164	50	-146.438317	75	-225.309014	100	-305.94007
26	-72.065028	51	-149.750452	76	-228.521712		

Tabla 4. Tabla de mínima energía potencial total encontrada para cúmulos puros átomos de cobre. La energía es dada en electrón volts.

3.1.2 Plata

En la figura 11 las estructuras de cúmulos de Ag pueden ser observadas, mientras que en la tabla 5 se muestran los resultados obtenidos, es decir los cúmulos de mas baja energía con 2 - 100 átomos. Al igual que los cúmulos de cobre, los cúmulos de plata de menor energía presentan variantes de la estructura icosaédrica, es fascinante la similitud que presentan las estructuras de los cúmulos de $n= 13, 19, 55$ y 100 con las estructuras de cobre, es decir la geometría de estos es muy parecida, los resultados de las estructuras encontradas para los cúmulos de plata concuerdan con los obtenidos por Garzón^(9,13).

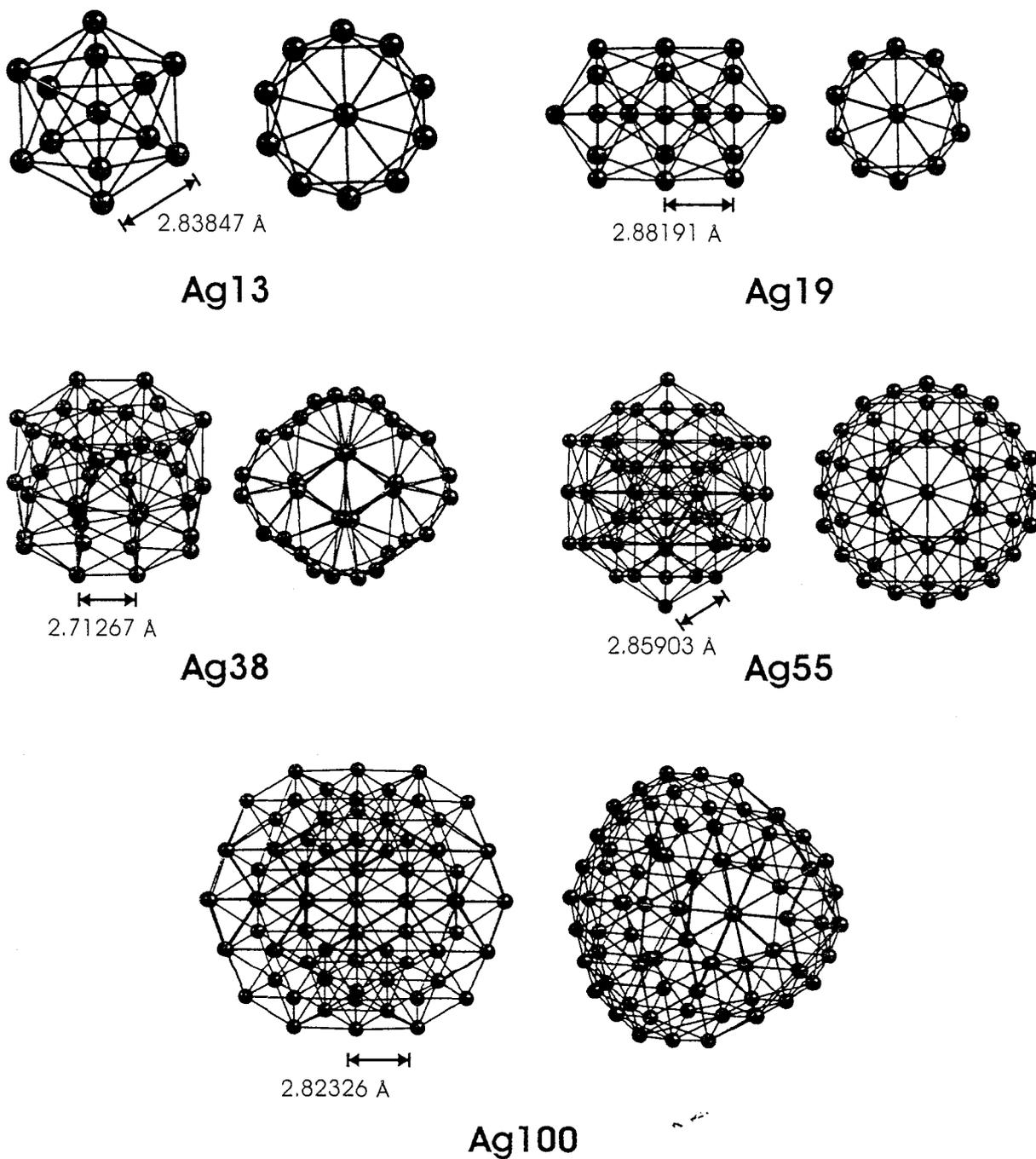


Figura 11. Dos vistas diferentes para las diferentes estructuras más estables encontradas para cúmulos de Ag; excepto el Ag38 que es inestable. Se muestra la distancia promedio en Å entre pares de átomos. Las estructuras que pueden ser observadas son: Icosaedro (13), Poli-icosaedro (19, 55, 100) y amorfa (38).

N	Ag E(N)	N	Ag E(N)	N	Ag E(N)	N	Ag E(N)
2	-2.714137	27	-66.332552	52	-133.454913	77	-200.95808
3	-5.007027	28	-68.98087	53	-136.292671	78	-203.28709
4	-7.53497	29	-71.532798	54	-139.163582	79	-206.325727
5	-9.939603	30	-74.228133	55	-142.031557	80	-208.948936
6	-12.487088	31	-76.885824	56	-144.330343	81	-211.729417
7	-14.952605	32	-79.543047	57	-146.877174	82	-214.487505
8	-17.318729	33	-82.177298	58	-149.689053	83	-217.103851
9	-19.839452	34	-84.78056	59	-152.215845	84	-219.834636
10	-22.360038	35	-87.542227	60	-155.005468	85	-222.613263
11	-24.857665	36	-90.143886	61	-157.782632	86	-225.286765
12	-27.501098	37	-92.849734	62	-160.353717	87	-228.01069
13	-30.46111	38	-95.481857	63	-163.019425	88	-230.731483
14	-32.724238	39	-98.368645	64	-165.796332	89	-233.60514
15	-35.292863	40	-100.960116	65	-168.366479	90	-235.968951
16	-37.805206	41	-103.532956	66	-171.270083	91	-238.248317
17	-40.328584	42	-106.207536	67	-173.816067	92	-241.479118
18	-42.8379	43	-108.969633	68	-176.597707	93	-244.680733
19	-45.703013	44	-111.563759	69	-179.202209	94	-247.416649
20	-48.164265	45	-114.273721	70	-182.236351	95	-250.182326
21	-50.657173	46	-117.162294	71	-185.144177	96	-252.913539
22	-53.310557	47	-119.726558	72	-187.698176	97	-255.64842
23	-55.936635	48	-122.425636	73	-190.45885	98	-258.745082
24	-58.406725	49	-125.313134	74	-192.847356	99	-261.286884
25	-61.095558	50	-127.868058	75	-195.707813	100	-264.089719
26	-63.721614	51	-130.575087	76	-198.317375		

Tabla 5. Tabla de mínima energía potencial total encontrada para cúmulos puros átomos de plata. La energía es dada en electrón volts.

3.1.3 Oro

Por último en la figura 12 las estructuras de cúmulos de Au y en la tabla 6 se muestran los resultados obtenidos, es decir los cúmulos de más baja energía con 2 - 100 átomos. A diferencia de los cúmulos de cobre y plata, los cúmulos de oro tienden a presentar estructuras de muy poca simetría que se describen como desordenados o amorfos. Esto se le atribuye a la interacción de corto alcance del potencial de Gupta en comparación al cobre o la plata. Las estructuras para cúmulos de pocos átomos ($n < 13$) presentan una similitud con los cúmulos de cobre y plata.

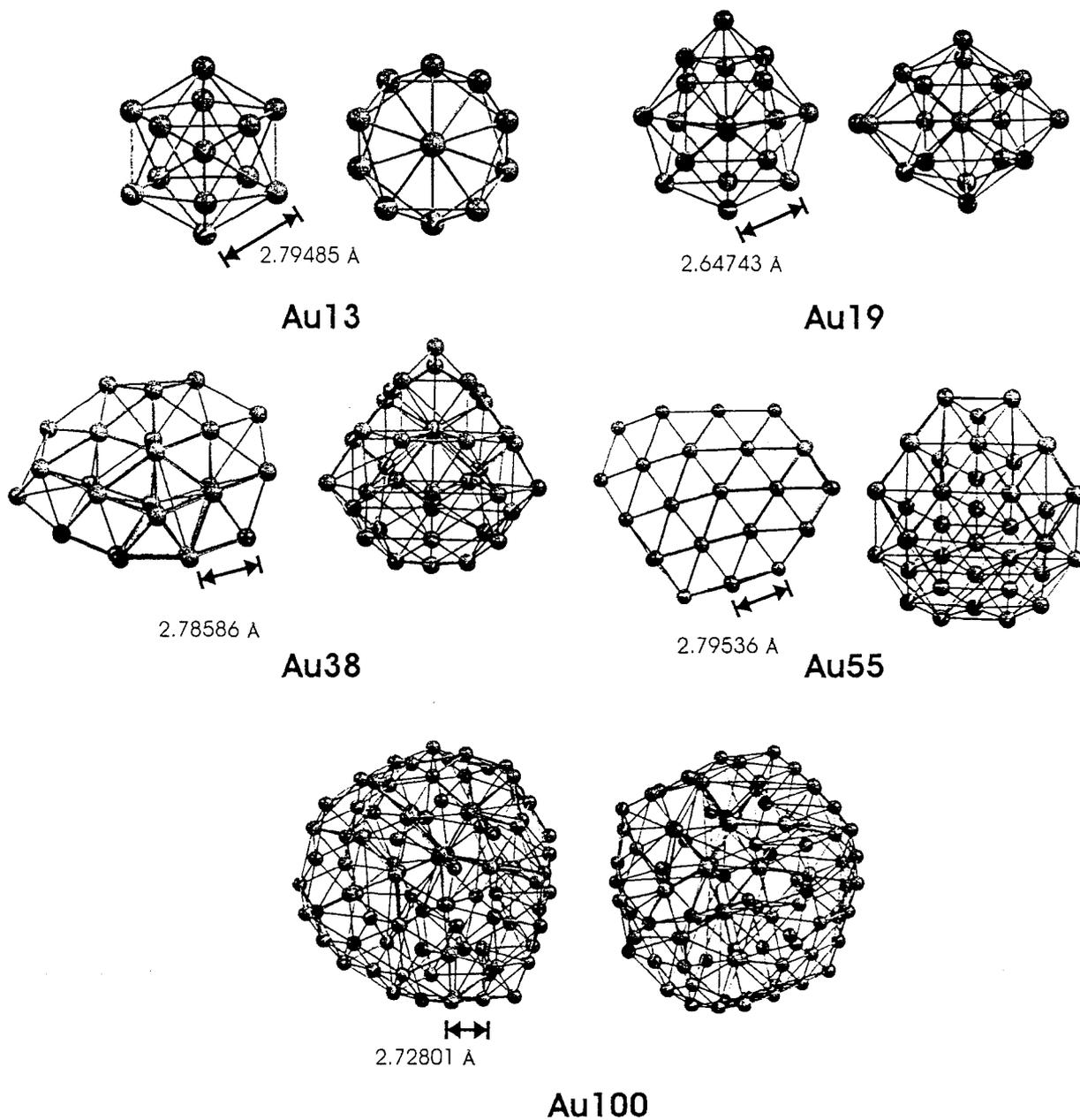


Figura 12. Dos vistas diferentes para las diferentes estructuras más estables encontradas para cúmulos de Au, excepto Au19 y Au55 que son inestables. En la gráfica se muestra la distancia promedio en Å entre pares de átomos. La estructura que puede ser observada es el Icosaedro (13); las demás estructuras son amorfas.

N	Au E(N)	N	Au E(N)	N	Au E(N)	N	Au E(N)
2	-4.836627	27	-91.501888	52	-180.36763	77	-270.248809
3	-8.185735	28	-95.033549	53	-183.93946	78	-273.613218
4	-11.712846	29	-98.620399	54	-187.495112	79	-276.836809
5	-15.086723	30	-102.218298	55	-191.006165	80	-280.176247
6	-18.588728	31	-105.564459	56	-194.605724	81	-284.117721
7	-21.991604	32	-109.142414	57	-197.888445	82	-287.312935
8	-25.316427	33	-112.662038	58	-201.586294	83	-290.780868
9	-28.749655	34	-116.271123	59	-205.203046	84	-294.491111
10	-32.160313	35	-119.735218	60	-208.558143	85	-298.304242
11	-35.529095	36	-123.307669	61	-212.41168	86	-301.662416
12	-38.922569	37	-126.964666	62	-215.953295	87	-305.299705
13	-42.554931	38	-130.473037	63	-219.542308	88	-308.602136
14	-45.958276	39	-133.976206	64	-223.1018	89	-312.234175
15	-49.505451	40	-137.572764	65	-226.777658	90	-315.589074
16	-53.057656	41	-141.099034	66	-230.375088	91	-319.393857
17	-56.549399	42	-144.660438	67	-233.849536	92	-323.380722
18	-60.010515	43	-148.227317	68	-237.58918	93	-327.060531
19	-63.435109	44	-151.809772	69	-241.088324	94	-330.33513
20	-66.869621	45	-155.352066	70	-244.632385	95	-334.000298
21	-70.35745	46	-158.892239	71	-248.048497	96	-338.012635
22	-73.920768	47	-162.471614	72	-251.706002	97	-341.318691
23	-77.478045	48	-166.10165	73	-255.476176	98	-345.098684
24	-81.005936	49	-169.614881	74	-258.860718	99	-348.686832
25	-84.436363	50	-173.165894	75	-262.743071	100	-352.053702
26	-87.933895	51	-176.708274	76	-266.282288		

Tabla 6. Tabla de mínima energía potencial total encontrada para cúmulos puros átomos de oro. La energía es dada en electrón volts.

Una vez que obtuvimos la energía potencial total más baja para cada cúmulo, es posible calcular la energía de enlace promedio para un cúmulo de n -átomos, definida como la cantidad positiva:

$$E_b = \frac{-V_{\text{cumulo}}}{N} \quad (6)$$

En donde V_{cumulo} es la energía potencial mínima del cúmulo que viene del cálculo de la ecuación (2). Las figuras 13, 14 y 15 muestran las gráficas de la energía de enlace promedio para los diferentes cúmulos estudiados.

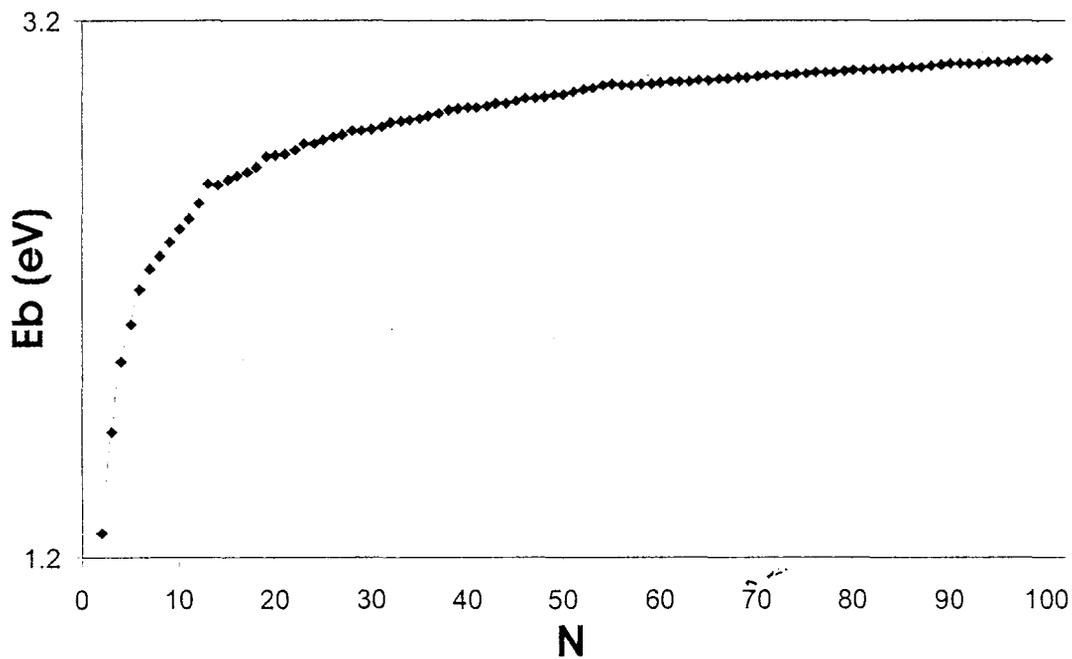


Figura 13. Gráfica de la energía de enlace promedio por número de átomos, para el cobre. Es posible observar que conforme $n \rightarrow \infty$ la energía de enlace tiende al valor experimental del metal sólido; que en el caso del cobre es 3.544 electrón volts.

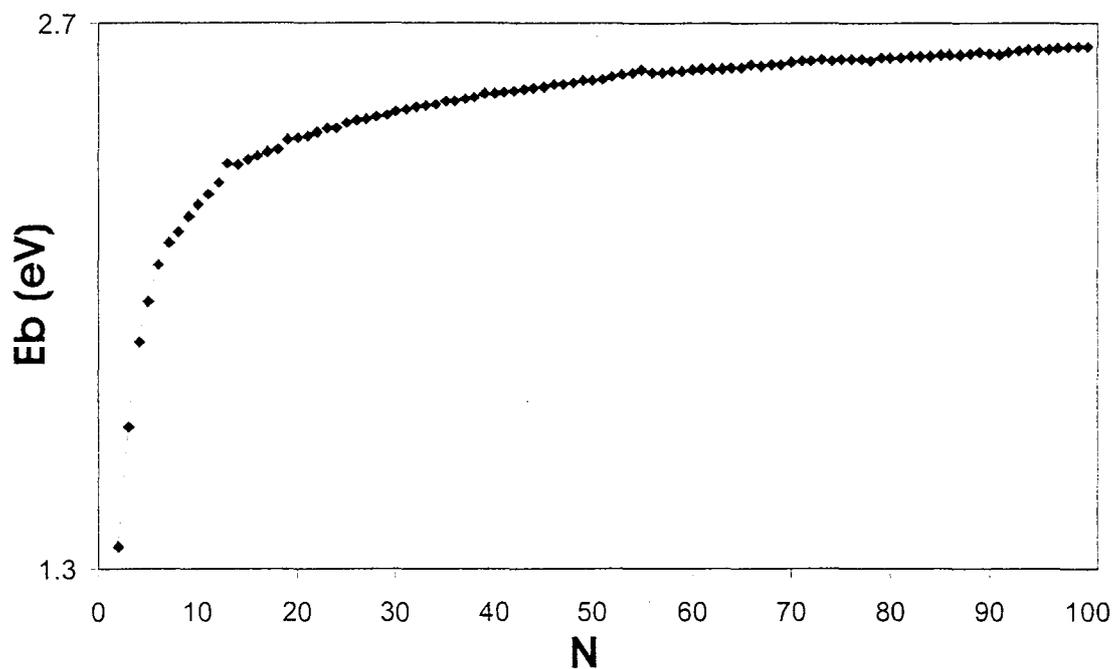


Figura 14. Gráfica de la energía de enlace promedio por número de átomos, para la plata. Es posible observar que conforme $n \rightarrow \infty$ la energía de enlace tiende al valor experimental del metal sólido; que en el caso de la plata es 2.960 electrón volts.

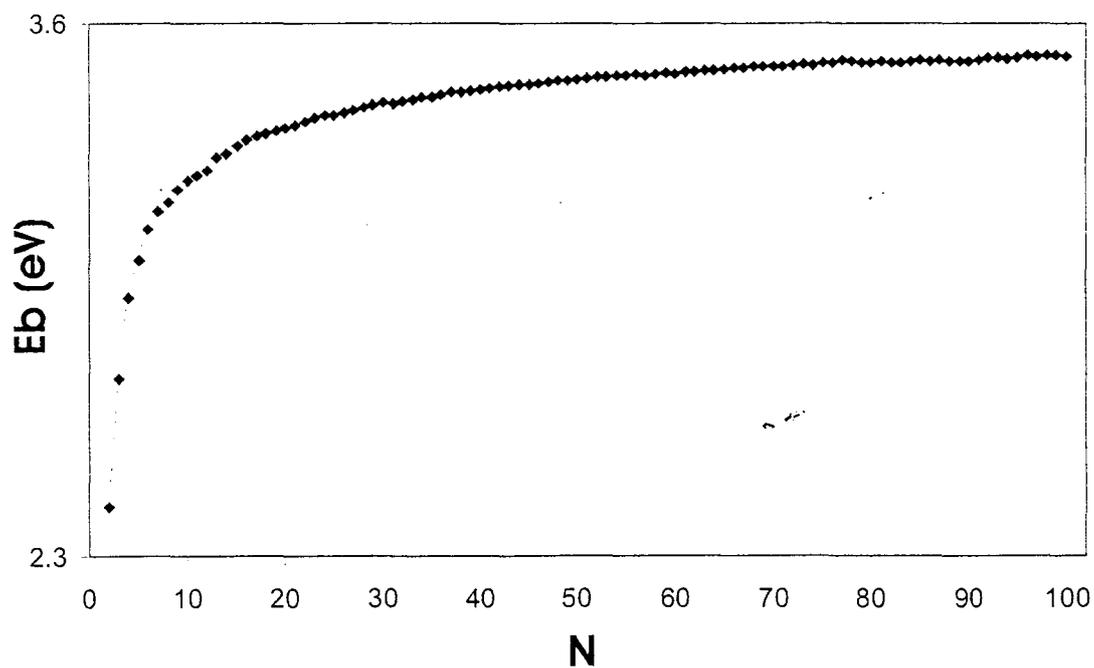


Figura 15. Gráfica de la energía de enlace promedio por número de átomos, para el oro. Es posible observar que conforme $n \rightarrow \infty$ la energía de enlace tiende al valor experimental del metal sólido; que en el caso del oro es 3.779 electrón volts.

3.2 Estabilidad

Si de la expresión (6) calculamos la segunda derivada obtenemos una expresión que nos representa la estabilidad relativa de las estructuras de un cúmulo de n -átomos con respecto a sus vecinos (cúmulos con $N-1$ y $N+1$ átomos). Cuya expresión es dada mediante las segundas diferencias de la energía (17)

$$S(N) = -E_b(N+1) - E_b(N-1) + 2E_b(N) \quad (7)$$

que es obtenida mediante el cálculo numérico de la segunda derivada a partir de la formula de tres puntos (25). En donde si la segunda derivada es positiva, existe un mínimo en ese punto. En las figuras 16, 17 y 18 podemos observar la estabilidad de los cúmulos de Cobre, Plata y Oro de acuerdo a la cantidad de átomos que los componen.

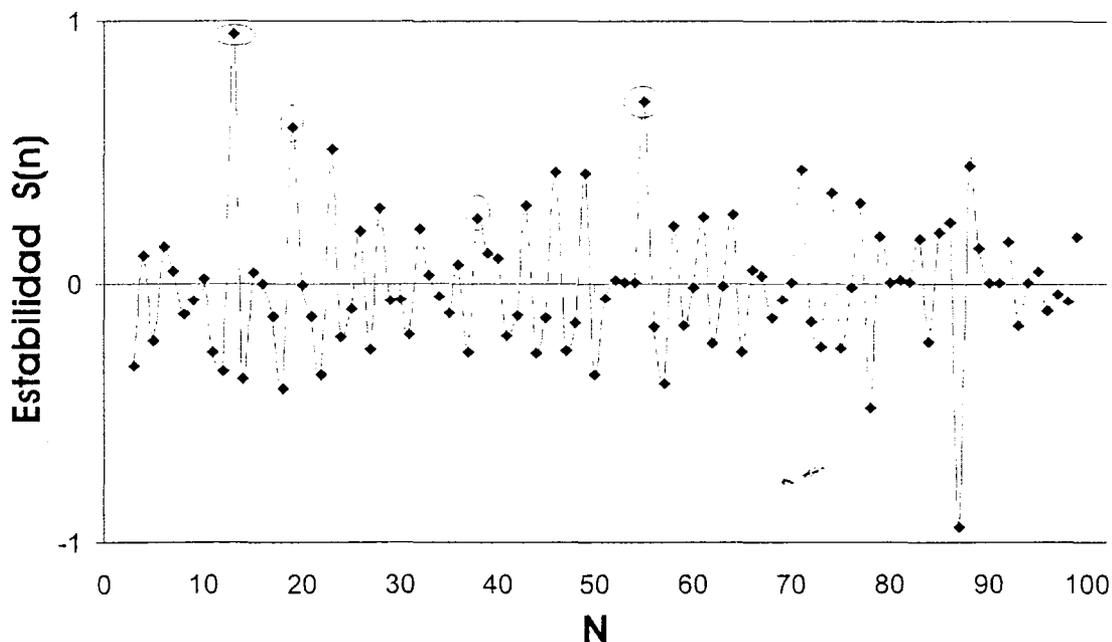


Figura 16. Gráfica de la estabilidad para cúmulos de cobre. Se encuentran encerrados en un círculo aquellos cúmulos cuyas estructuras se han publicado en este trabajo. Es necesario aclarar que en esta gráfica no se encuentra la estabilidad del cúmulo de $n=100$ debido que no se calculó el cúmulo de 101 átomos.

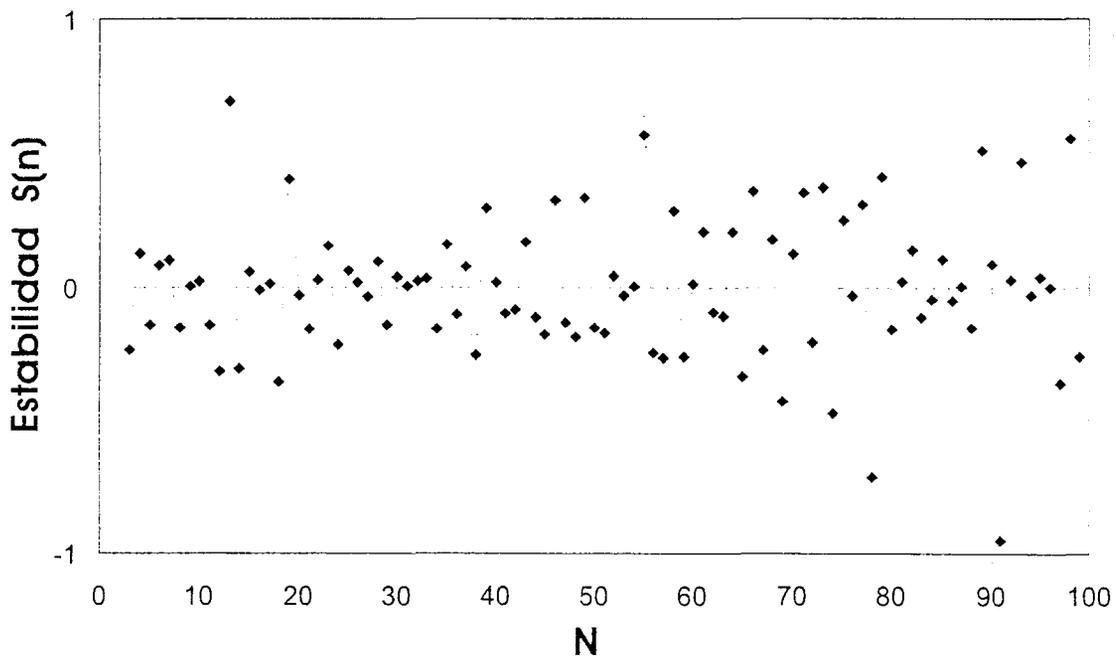


Figura 17. Gráfica de la estabilidad para cúmulos de plata. Se encuentran encerrados en un círculo aquellos cúmulos cuyas estructuras se han publicado en este trabajo. Es necesario aclarar que en esta gráfica no se encuentra la estabilidad del cúmulo de $n=100$ debido que no se calculó el cúmulo de 101 átomos.

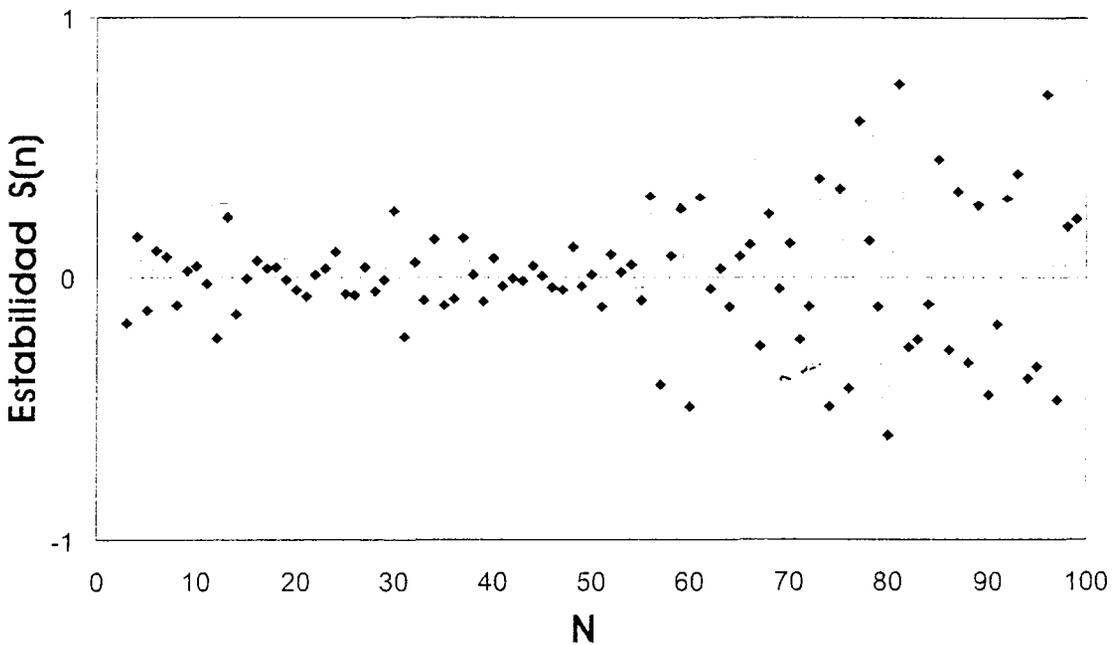


Figura 18. Gráfica de la estabilidad para cúmulos de plata. Se encuentran encerrados en un círculo aquellos cúmulos cuyas estructuras se han publicado en este trabajo. Es necesario aclarar

que en esta gráfica no se encuentra la estabilidad del cúmulo de $n=100$ debido que no se calculó el cúmulo de 101 átomos.

3.3 Factor de Estructura

El cálculo del factor de estructura ⁽⁹⁾, nos provee de una caracterización de la estructura local del cúmulo, que es relativamente independiente de su tamaño y morfología. Para ello, el factor de estructura, se calcula experimentalmente como:

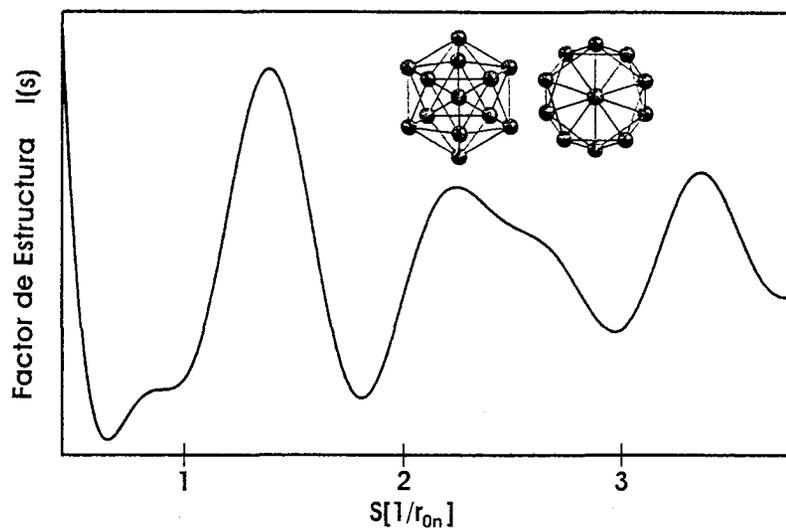
$$I(s) = \sum_{i,j=1}^n f_i f_j \frac{\text{sen}(2\pi s r_{ij})}{2\pi s r_{ij}} \quad (8)$$

en donde:

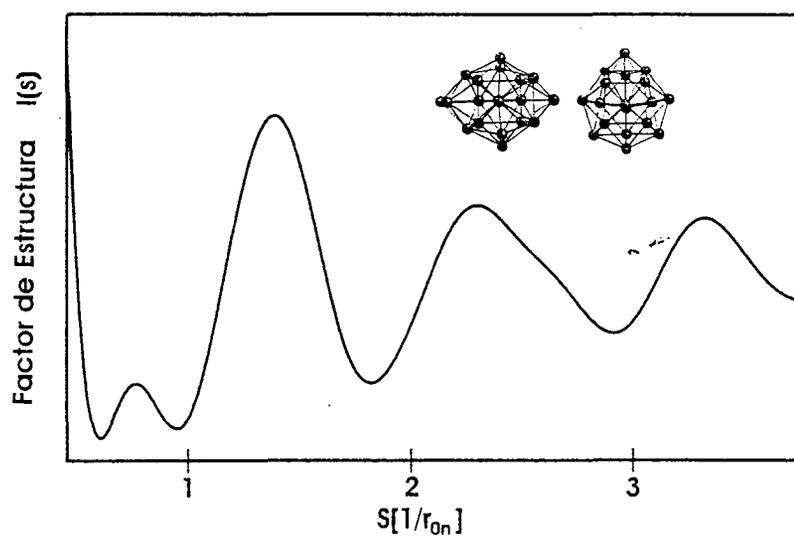
$$s = \frac{2}{\lambda} \text{sen} \theta \quad (9)$$

en el cual, experimentalmente θ es el ángulo con el cual inciden los rayos X y λ es la longitud de onda de esos rayos; r_{ij} es la distancia en unidades reducidas entre los átomos i y j del cúmulo; el factor atómico de dispersión f_i y f_j se les asignó el valor de 1.0. Con esta expresión obtenemos directamente $I(s)$ sin necesidad de aplicar la transformada de Fourier a $g(r)$. Las siguientes figuras muestran el factor de estructura obtenido en la investigación para los cúmulos de Oro, Plata y Cobre con $n = 13, 19, 38, 55$ y 100 átomos.

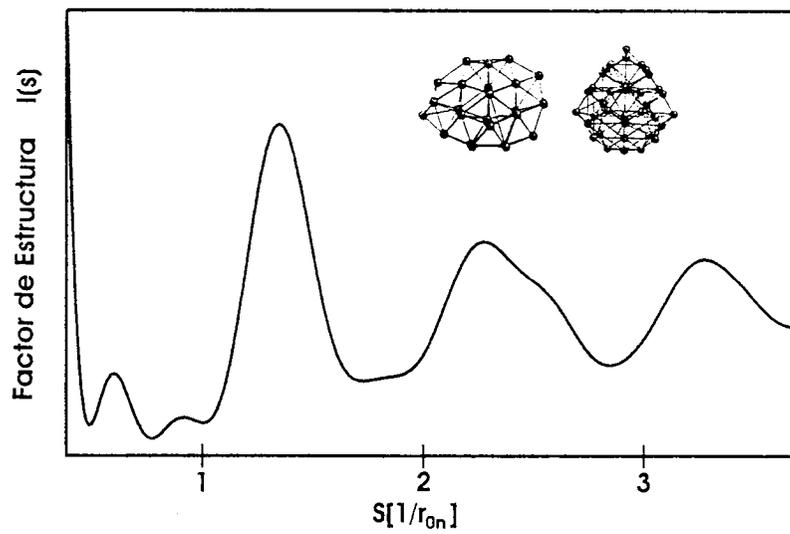
Au13



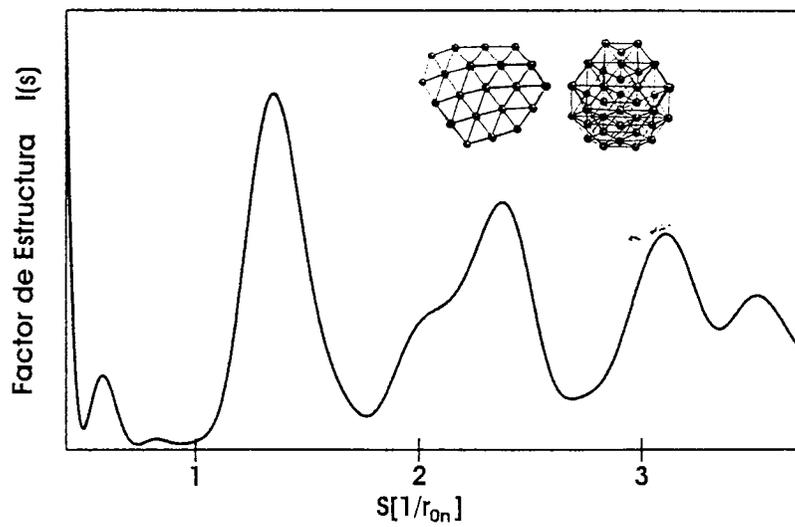
Au19



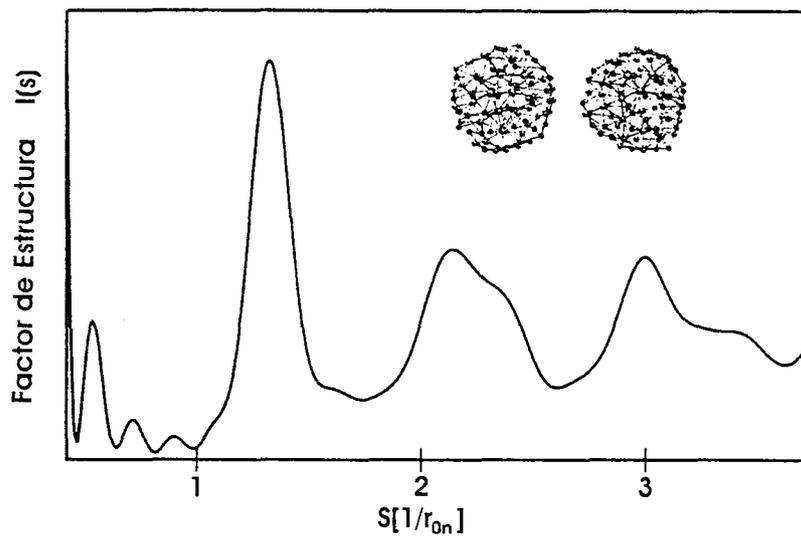
Au38



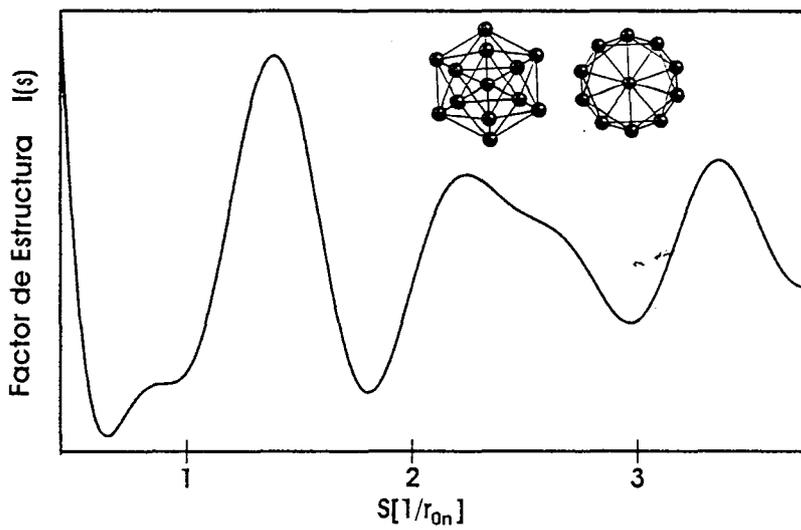
Au55



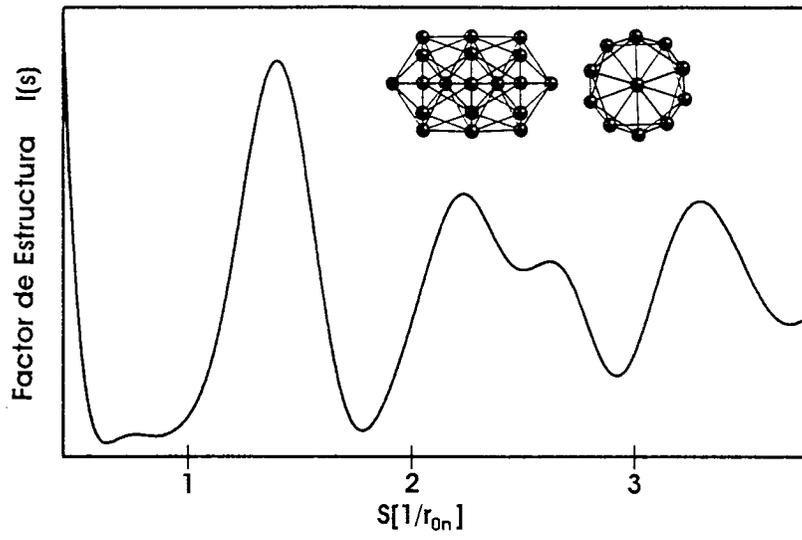
Au100



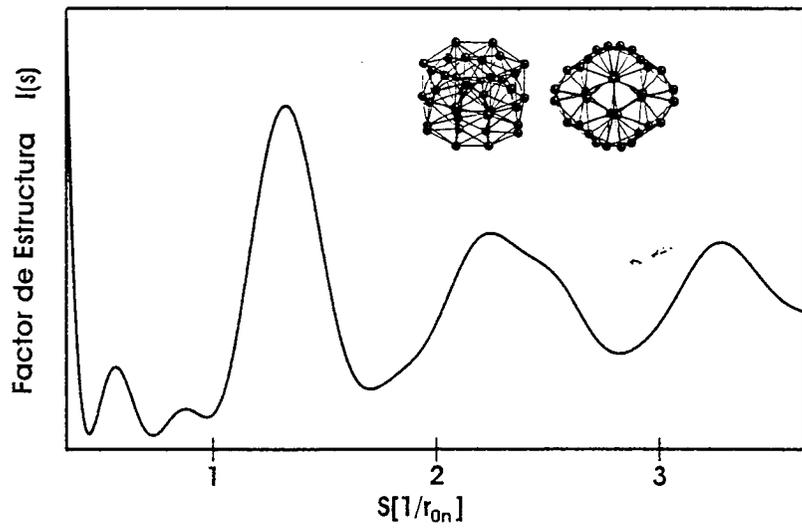
Ag13



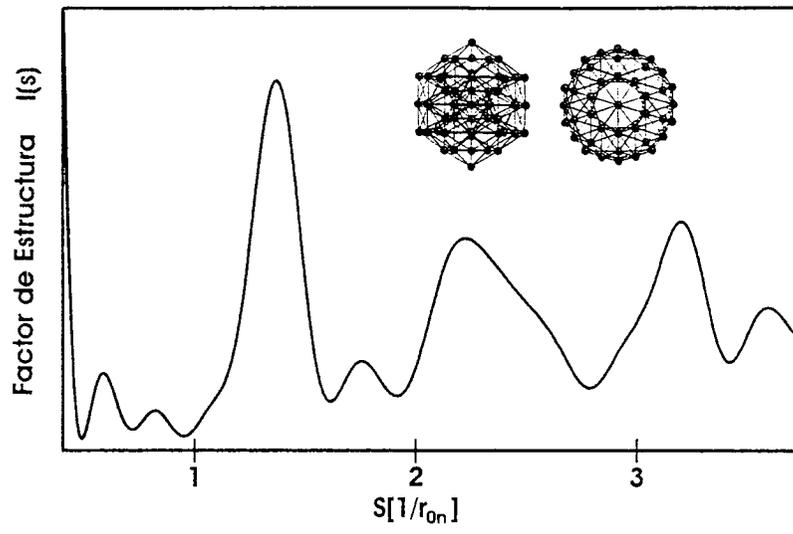
Ag19



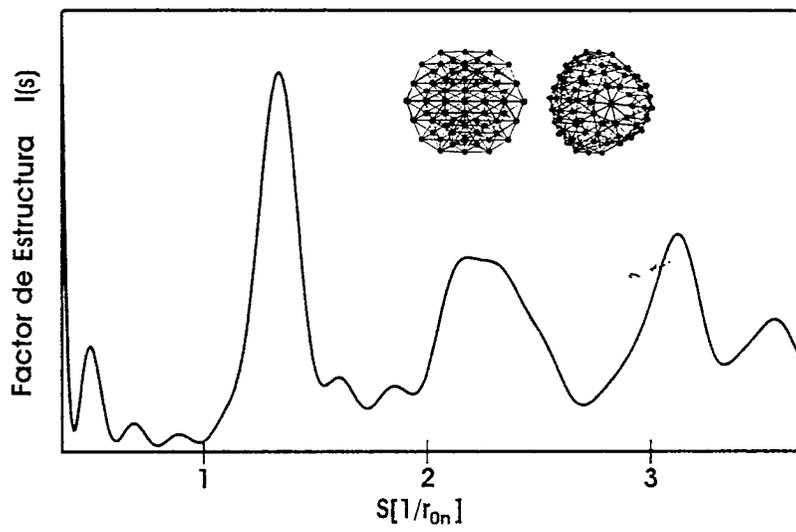
Ag38



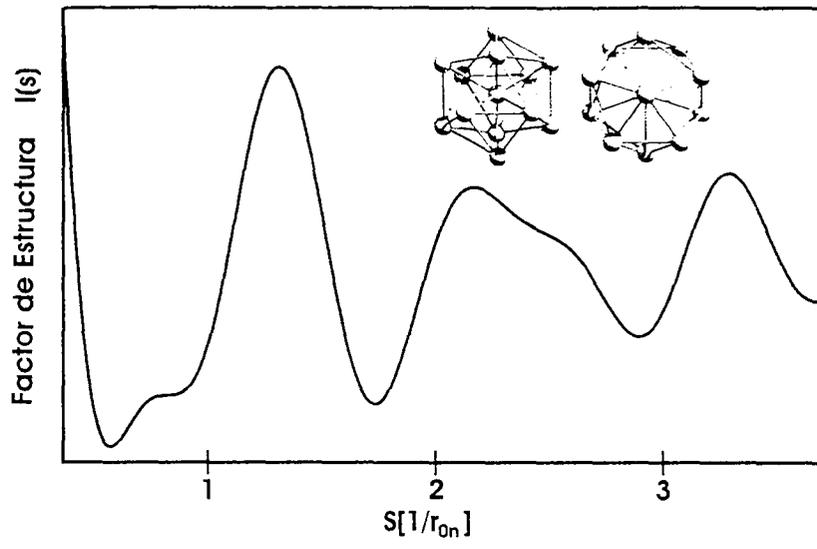
Ag55



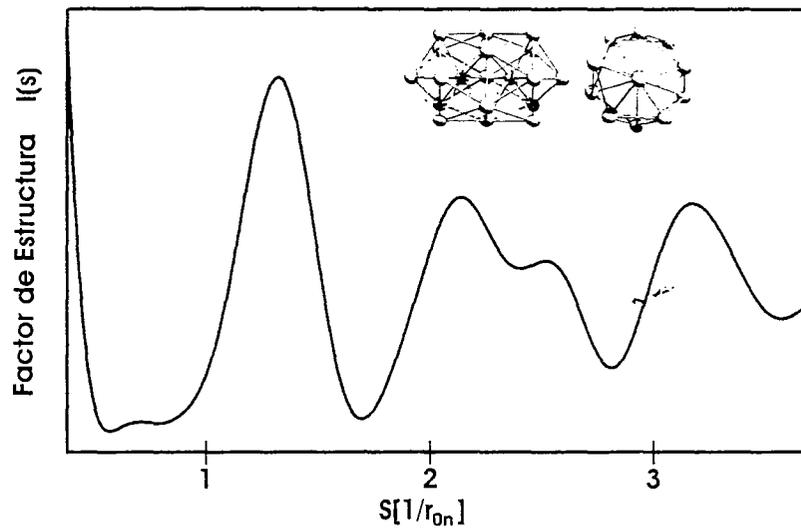
Ag100

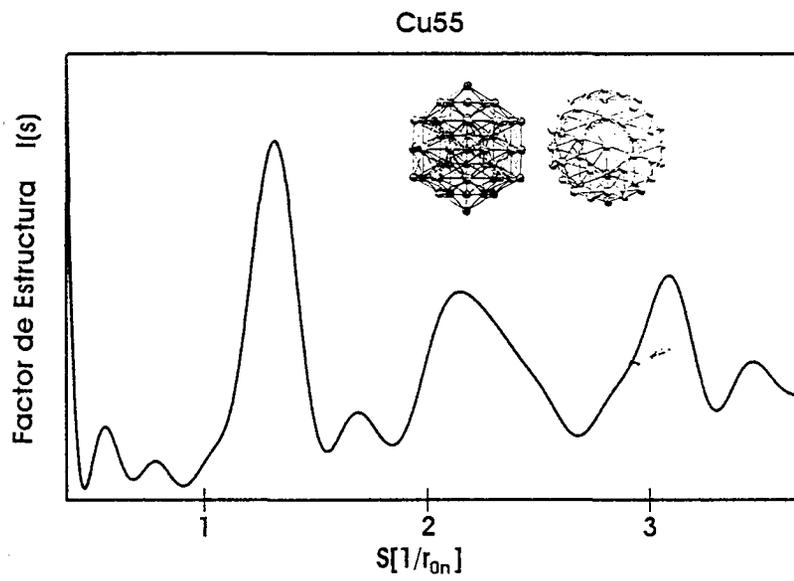
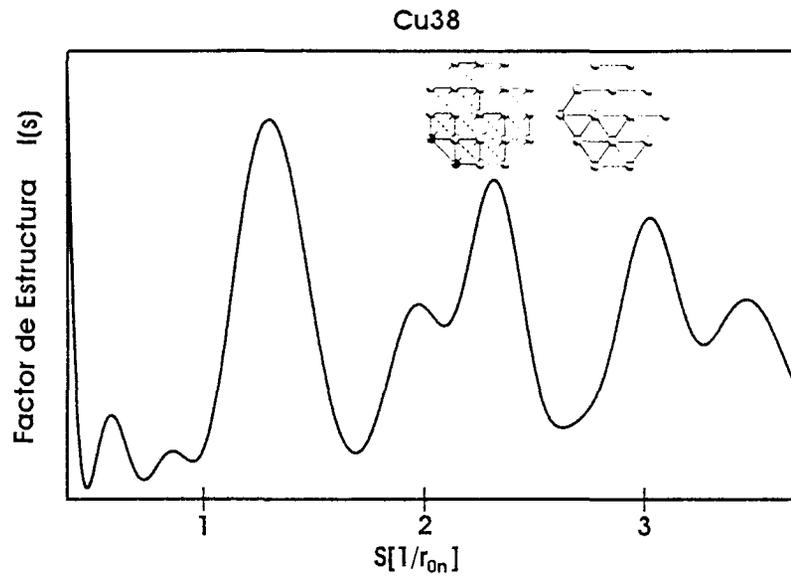


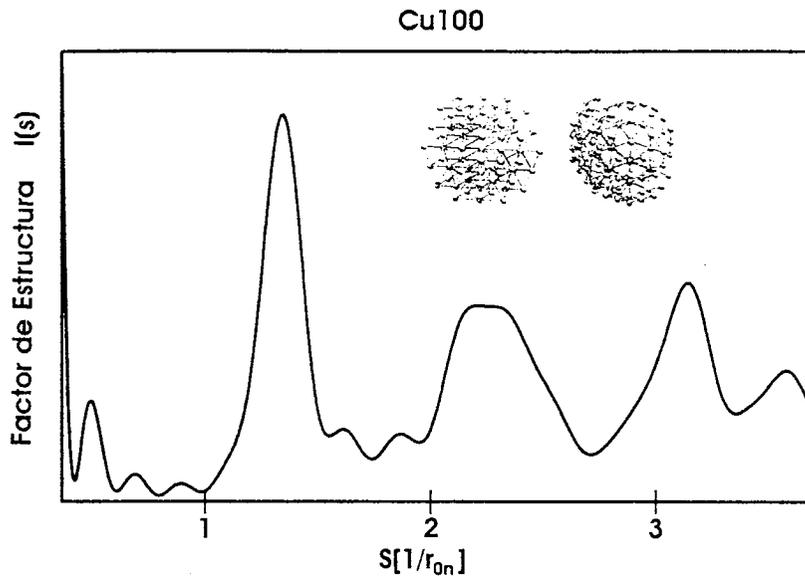
CU13



Cu19







Experimentalmente el factor de estructura se expresa habitualmente como la relación entre la amplitud resultante de la radiación dispersada por la distribución continua de densidad electrónica entre la dispersada por un electrón libre en el origen; es decir, depende de la distribución de densidad electrónica y del vector de “scattering”⁽²⁹⁾.

CONCLUSIONES

Discutiremos los resultados que hemos obtenido, haciendo una comparación con resultados obtenidos por otros investigadores.

A lo largo de esta investigación hemos estudiado las propiedades estructurales y la estabilidad de cúmulos de tres metales nobles (Oro, Plata y Cobre) tomando diferente número de átomos, por medio de un algoritmo genético utilizando un potencial de interacción de n-cuerpos llamado potencial de Gupta.

Los resultados encontrados en este proyecto de tesis presentan una gran similitud a los resultados obtenidos por Johnston ⁽¹²⁾ y Garzón ^(9,13), en los cuales se basó este trabajo.

Uno de los resultados más importantes de esta investigación, fue encontrar la gran abundancia de estructuras basadas en el icosaedro, lo cual nos indica que los cúmulos presentan un crecimiento poli-icosaedral conforme aumenta el número de átomos en el cúmulo. También observamos que para los cúmulos grandes de oro de más baja energía se presentaba una estructura amorfa o desordenada pero de gran estabilidad. Resultados encontrados mediante otras metodologías confirman lo encontrado en el presente estudio ⁽⁹⁾.

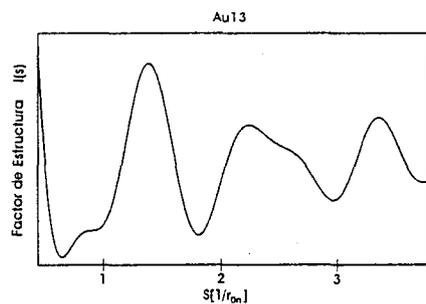
Por otro lado, en esta investigación, fue necesario diseñar un programa basado en delphi, que nos permitiera encontrar el factor de estructura de cada cúmulo conociendo las posiciones xyz de cada átomo en el cúmulo. Para conseguir una mayor precisión en las gráficas de factor de estructura, es necesario hacer una re optimización del cúmulo utilizando el método DFT-LDA (Teoría de Funcionales de la Densidad con Aproximación de Densidad Local) y después utilizar una función exponencial del tipo $e^{(-Bs^2/2)}$ con información térmica del cúmulo, en donde el valor **B** parece ser independiente del tamaño del cúmulo. En las siguientes figuras observamos una comparación de los resultados obtenidos en esta tesis con los resultados obtenidos por Garzón ⁽⁹⁾; solo los



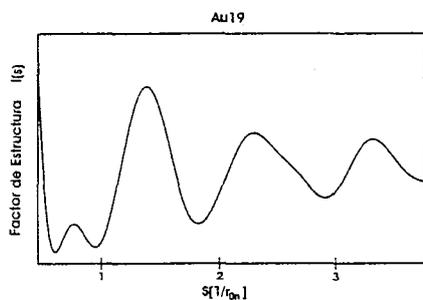
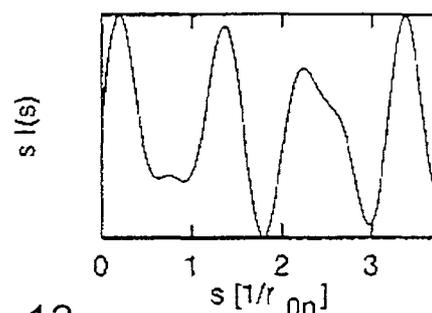
cúmulos de Ag y Au son comparados. El cúmulo Au55, no se compara ya que el obtenido en esta tesis tiene una estructura distinta a la encontrada por Garzón, También es necesario mencionar que en todas las graficas de resultados se omite el primer pico, esto se debe a que al hacer el cálculo del factor de estructura el cúmulo no se encuentra optimizado, y dicho pico excede los limites de la gráfica.

Resultados de Tesis

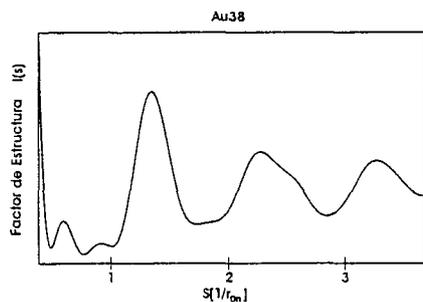
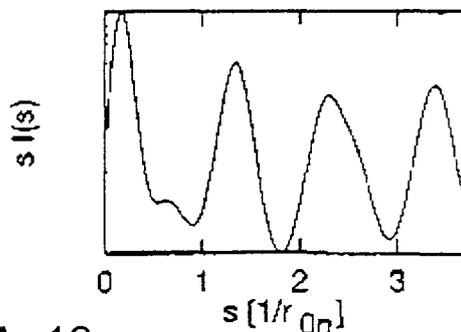
Resultados de Garzón



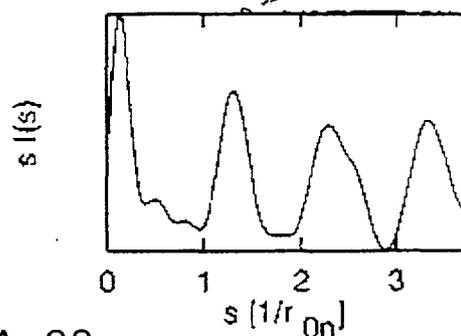
Au13



Au19

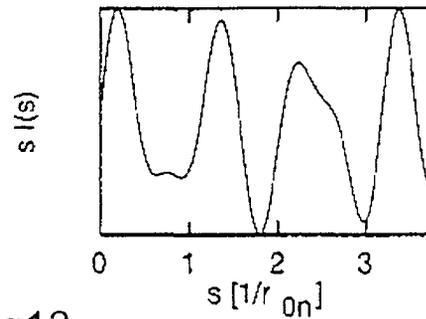
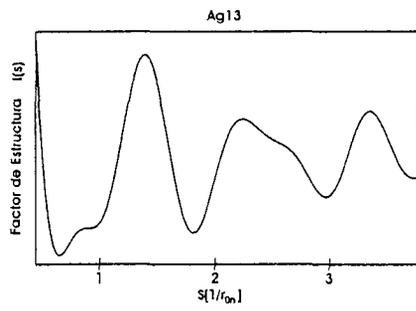


Au38

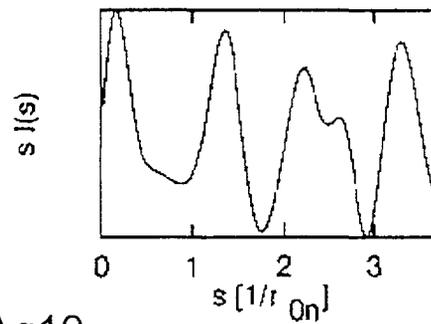
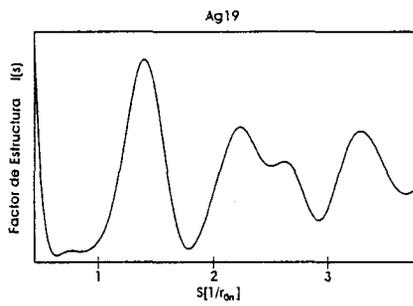


Resultados de Tesis

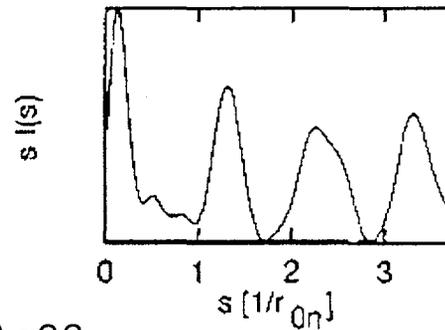
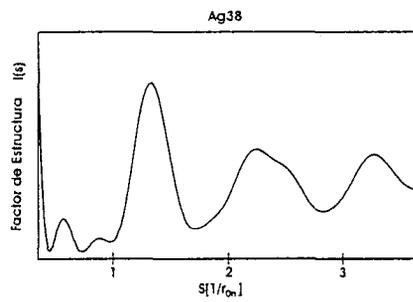
Resultados de Garzón



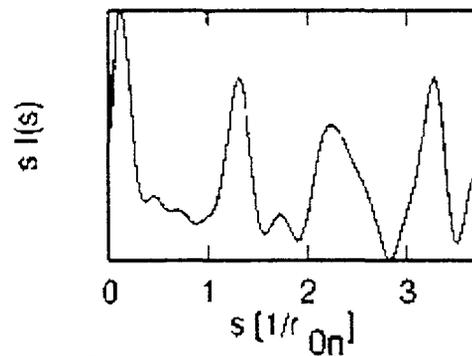
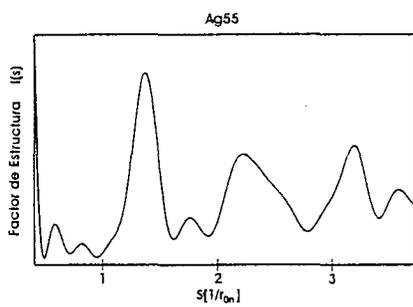
Ag13



Ag19



Ag38

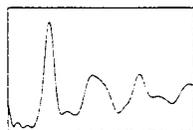
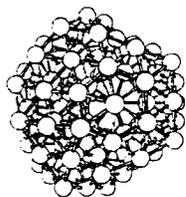


Ag55

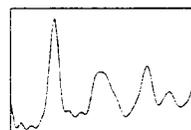
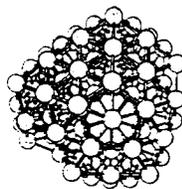
ANEXOS

Con la finalidad de poner a prueba el programa elaborado para el cálculo del Factor de Estructura los siguientes anexos son una continuación del trabajo realizado por Johnston ⁽¹²⁾ y Garzón ^(9,13).

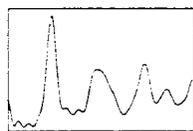
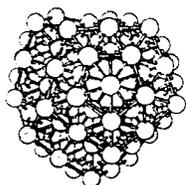
Anexo 1: Muestra las estructuras y el factor de estructura para cúmulos puros de Ag, Au y Cu de n=88 - 99 átomos.



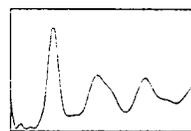
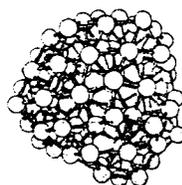
Ag88



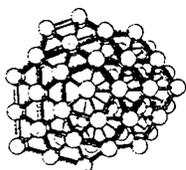
Ag89



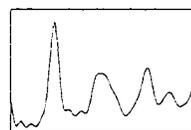
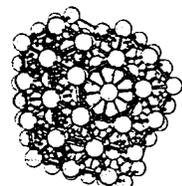
Ag90



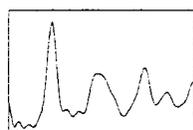
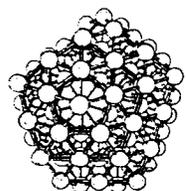
Ag91



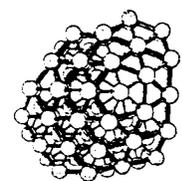
Ag92



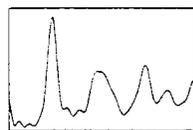
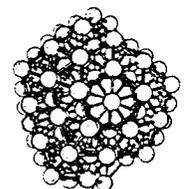
Ag93



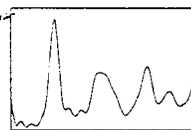
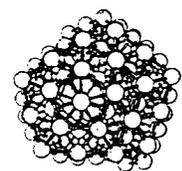
Ag94



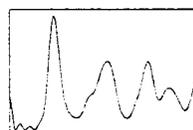
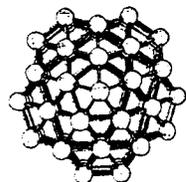
Ag95



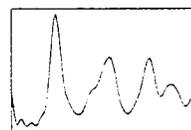
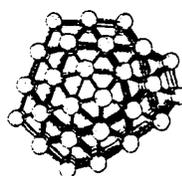
Ag96



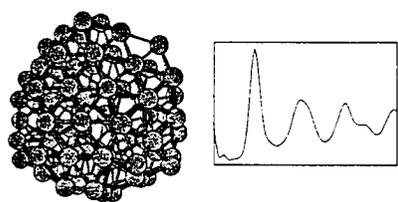
Ag97



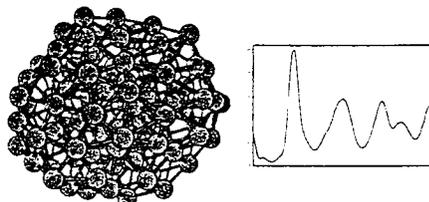
Ag98



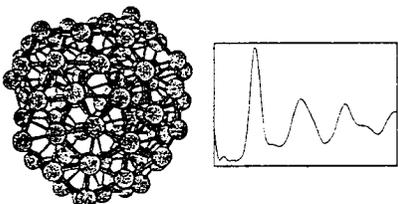
Ag99



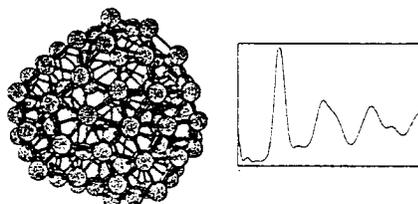
Au88



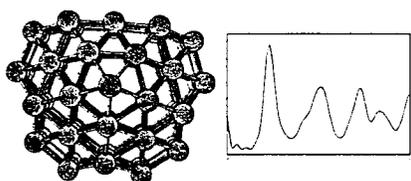
Au89



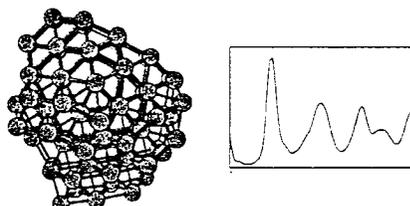
Au90



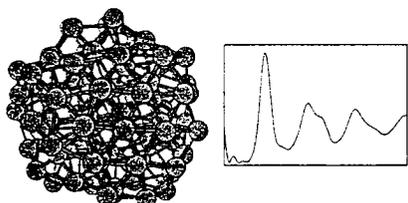
Au91



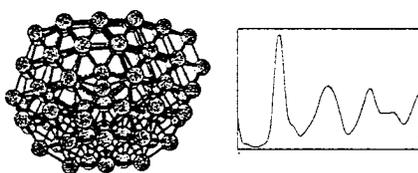
Au92



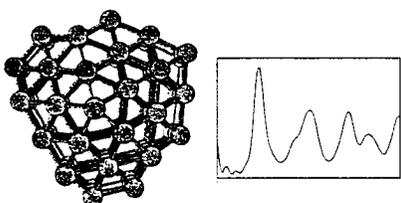
Au93



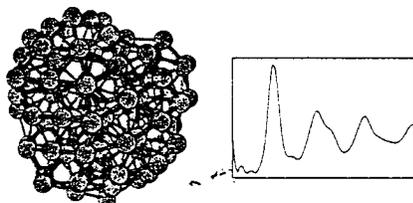
Au94



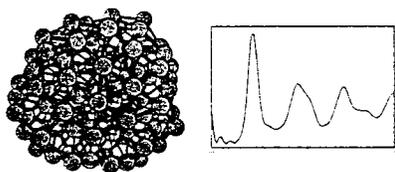
Au95



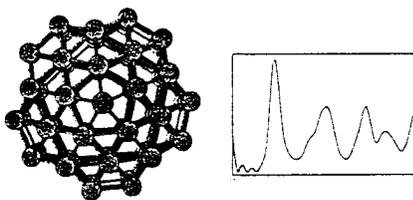
Au96



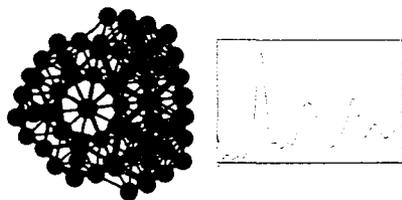
Au97



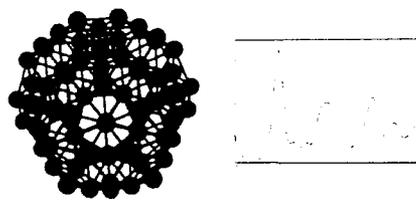
Au98



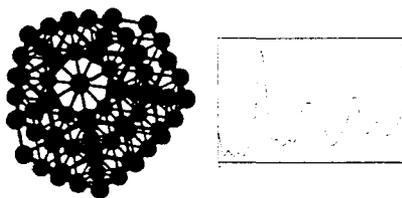
Au99



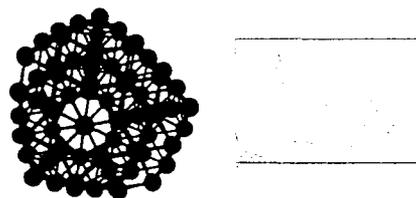
Cu88



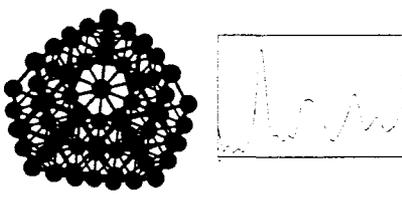
Cu89



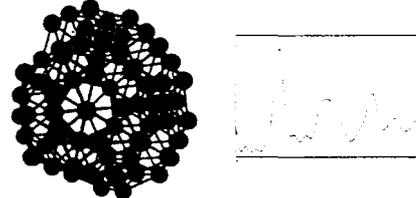
Cu90



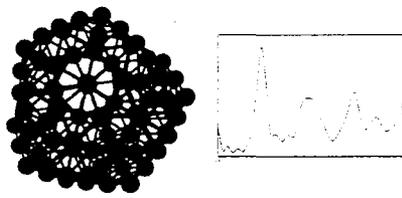
Cu91



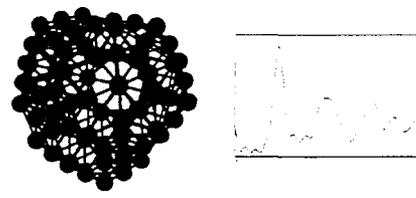
Cu92



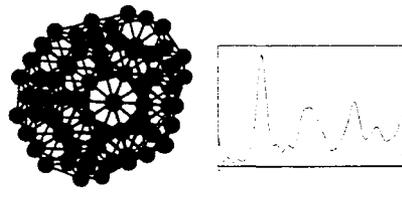
Cu93



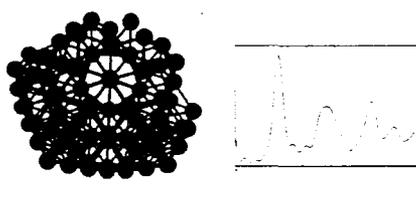
Cu94



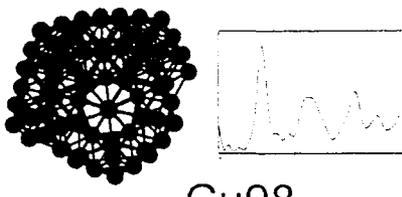
Cu95



Cu96



Cu97

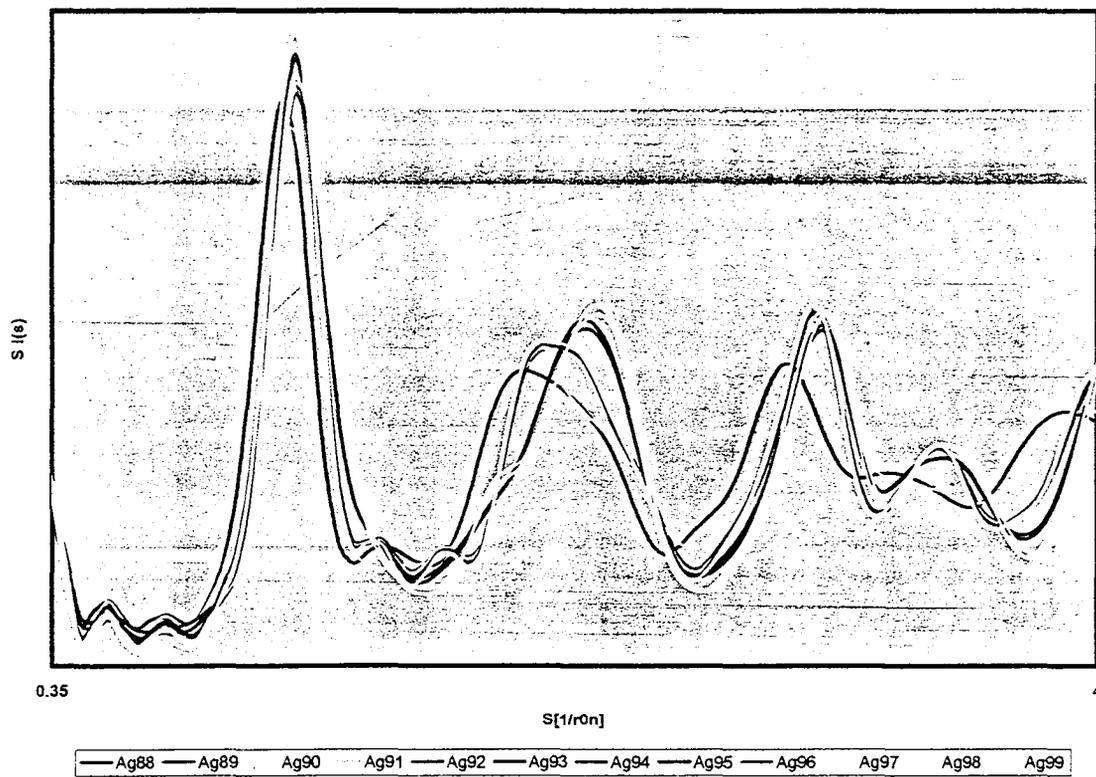


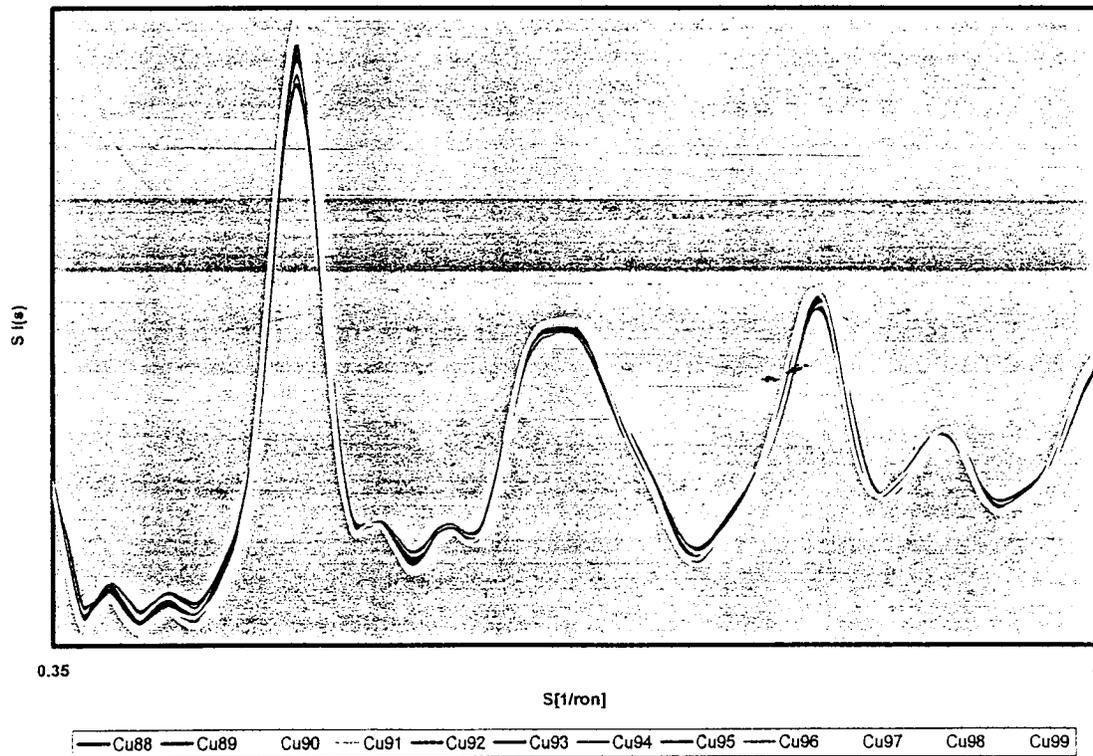
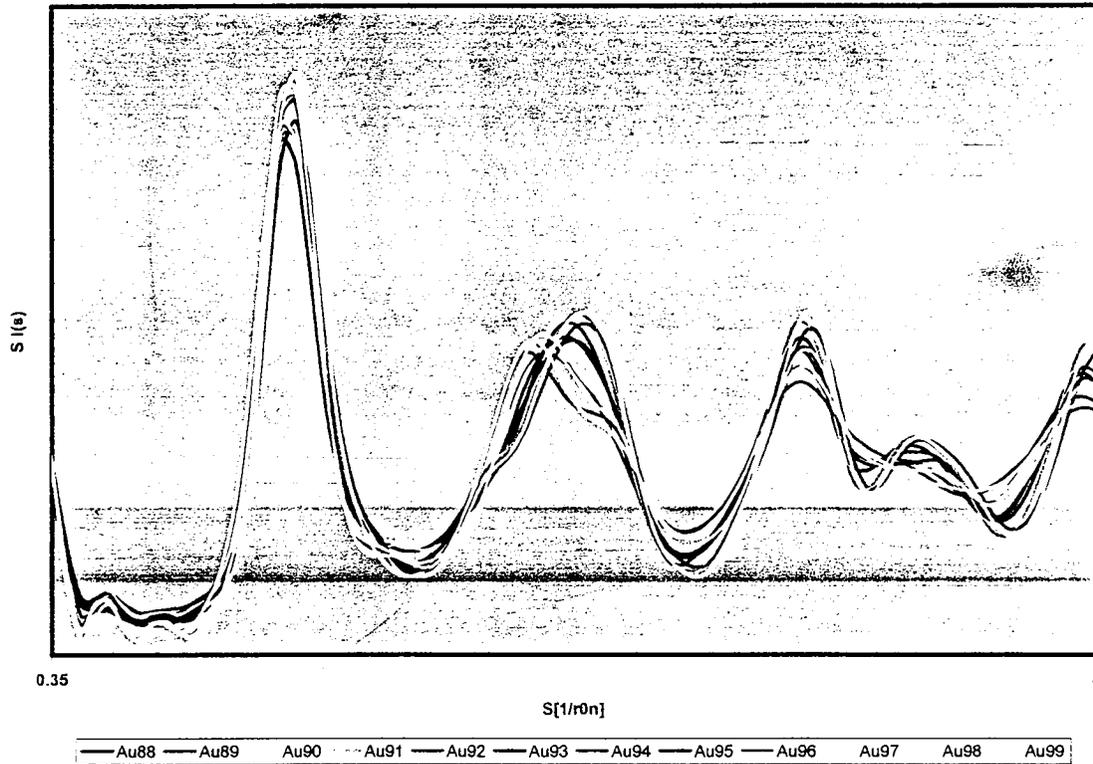
Cu98



Cu99

Anexo 2: Se muestran en una sola imagen las gráficas del factor de estructura para cúmulos puros de Ag, Au y Cu de $n=88 - 99$ átomos. Con el objetivo de visualizar una comparación.





APENDICES

Apéndice A

Aproximación esférica de cúmulos ⁽²⁸⁾

En esta aproximación, tomamos un cúmulo de N-átomos y lo modelamos con una esfera. Esto lo convierte en una mejor aproximación conforme crece el cúmulo y permite encontrar ecuaciones para conocer el número y la fracción de átomos en la superficie del cúmulo. Para un cúmulo esférico de N-átomos, el radio (R_c), área de la superficie (S_c) y volumen (V_c) del cúmulo se relacionan al radio (R_a), área de la superficie (S_a) y volumen (V_a) de los átomos que lo constituyen.

Expresamos el volumen del cúmulo en términos del volumen y número de átomos como:

$$V_c = NV_a \quad (10)$$

como estamos modelando al cúmulo y al átomo como esferas tenemos:

$$\frac{4}{3} \pi R_c^3 = N \frac{4}{3} \pi R_a^3 \quad (11)$$

de donde obtenemos que:

$$R_c = N^{1/3} R_a \quad (12)$$

El área de la superficie del cúmulo se relaciona con la del átomo como:

$$S_c = 4\pi R_c^2 = 4\pi (N^{1/3} R_a)^2 = N^{2/3} S_a \quad (13)$$

En el límite de un cúmulo grande, el número de átomos en la superficie (N_s) en un cúmulo se da dividiendo el área de la superficie del cúmulo por el área seccional del átomo (A_a), esto es:

$$N_s = \frac{4\pi N^{2/3} R_a^2}{\pi R_a^2} = 4N^{2/3} \quad (14)$$

Muchas de las propiedades de los cúmulos dependen de la fracción de átomos (F_s) en la superficie, en donde para cúmulos pseudo-esféricos esta dado por:

$$F_s = \frac{N_s}{N} = 4N^{-1/3} \quad (15)$$

Referencias

- ¹ SMALLEY, R., Yacobson. B. "Fullerene Nanotubes: C^{1,000,000} and Beyond" *American Scientist* (E.U.A) pre impresión, July-1997
- ² Willihnganz, Alexis. "Software that writes software" Salon, 10 de agosto de 1998. http://www.salon.com/tech/feature/1999/08/10/genetic_programming/
- ³ Charbonneau, Paul. "Genetic algorithms in astronomy and astrophysics" *The Astrophysical Journal Supplement Series*, vol.101, p.309-334 (diciembre de 1995).
- ⁴ Forrest, Stephanie. "Genetic algorithms: principles of natural selection applied to computation" *Science*, vol.261, p.872-878 (1993).
- ⁵ Goldberg, David. "Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning" Addison-Wesley, 1989.
- ⁶ Holland, John. "Genetic algorithms" *Scientific American*, julio de 1992, p. 66-72.
- ⁷ Tang, K.S., K.F. Man, S. Kwong y Q. He. "Genetic algorithms and their applications" *IEEE Signal Processing Magazine*, vol.13, no.6, p.22-37 (noviembre de 1996).
- ⁸ F. Cleri and V. Rosato. *Phys. Rev. B*, 48(1):22-33, 1993.

- ⁹ K. Michaelian, N. Rendo'n, and I. L. Garzón. "Structure and energetics of Ni, Ag, and Au nanoclusters", PHYSICAL REVIEW B, VOLUME 60, NUMBER 3, Julio 15 1999-I
- ¹⁰ B. Hartke, J. Phys. Chem. **97**, 9973 _1993_.
- ¹¹ Y. Xiao and D. E. Williams, Chem. Phys. Lett. **215**, 17 _1993_.
- ¹² Sarah Darby, Thomas V. Mortimer-Jones, Roy L. Johnston,a) and Christopher Roberts "Theoretical study of Cu-Au nanoalloy clusters using a genetic algorithm", JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, VOLUME 116, NUMBER 4, enero 22 2002.
- ¹³ K. Michaelian, M. R. Beltrán, I. L. Garzón. "Disordered global-minima structures for Zn and Cd nanoclusters", PHYSICAL REVIEW B, VOLUME 65, 041403(R).
- ¹⁴ F. Cleri and V. Rosato, Phys. Rev. B **48**, 22 _1993_.
- ¹⁵ G. Benedek, T.P. Martin, and G. Paccioni, "Elemental and Molecular clusters", eds., Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- ¹⁶ J.M. Montejano-Carrizales, M.P. Iñiguez, J.A. Alonso, and M.J. Lopez, Phys. Rev. B **54**, (1996), 5961.
- ¹⁷ Margarita Franco Ortiz, Alvaro Posada Amarillas, Christopher Roberts, Thomas V. Mortimer-Jones, Roy L. Johnston. "Estructura y Estabilidad de Cúmulos de Niquel". Resultados Preliminares.
- ¹⁸ Young-Kyu Han and Jaehoon Jung, "Structure and Stability of Al₁₃I clusters" Journal of Chemical Physics, Volume 121, Number 17, Noviembre 1 2004.
- ¹⁹ Eva Fernandez, Jose Soler, Ignacio Garzón, Luis Balbás, "Trends in the Structure and Bonding of noble metal clusters", American Physical Society, 70 165403-1, 2004. www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/109720405/ABSTRACT
- ²⁰ Gianpietro Malessio, "Intermolecular potential - Past, Present, Future" www.nature.com/naturematerials, vol. 2, Agosto 2003.

²¹ Robert M. Dickson, "Emission from Au₅, Au₈ and Au₁₃ nanocluster solutions under ultraviolet irradiation" The American Physical Society. Phys. Rev. Lett. 93, 077402 (2004):

²² J. Rogan, R. Ramirez, A.H. Romero y M. Kivi, "Rearrangement collisions between gold clusters". Eur. Phys. J. D (2003)

²³ N. T. Wilson, Ph.D. thesis, University of Birmingham, 2000.

²⁴ H. Cox, R. L. Johnston, and J. N. Murrell, J. Solid State Chem. 145, 517_1999_.

²⁵ Tao Pang, "An Introduction to Computational Physics", Cambridge University Press, New York, 1997.

²⁶ Raju P. Gupta , "Lattice relaxation at a metal surface", Phys. Rev. B 23, 6265 (1981).

²⁷ Fabrizio Clero y Vittorio Rosato, "Tight-binding potentials for transition metals and alloys", Phys. Rev. B, Volúmen 48, Número 1, 1 de Julio de 1993.

²⁸ Roy L. Johnston, "Atomic and Molecular Clusters". ©2002, Ed. Taylor & Francis.

²⁹ "Difracción de rayos-x y estructura cristalina", correo electrónico: aap@sauron.quimica.uniovi.es

³⁰ Biblioteca de Consulta Microsoft ® Encarta ® 2005. © 1993-2004 Microsoft Corporation.

³¹ <http://www.metallogenesis.com/Spain/theorie.html>

³² <http://ib.cnea.gov.ar/materiales/g2-98.html>

³³ <http://www.webelements.com/>

³⁴ <http://www.se.iucr.rog/iucr-top/comm/cteach/pamphlets/3/3.html>

³⁵ <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>