

**BENEMÉRITA UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA DE PUEBLA**

**FACULTAD DE INGENIRÍA
COLEGIO DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA**

**“PROPIEDADES ESTRUCTURALES EN
NANOPARTÍCULAS BIMETÁLICAS. UN ESTUDIO
MEDIANTE MECÁNICA MOLECULAR.”**

TESIS

**PARA OBTENER EL GRADO DE
LICENCIATURA EN INGENIERÍA
MECÁNICA Y ELÉCTRICA**

PRESENTA:

KEVIN CASTILLO PALMA

ASESOR:

DR. MARTÍN SALAZAR VILLANUEVA

Agradecimientos

- A mi madre Renata Palma y a mi padre Edilberto Castillo por todo el amor, el apoyo incondicional y la confianza que han depositado en mí durante estos 23 años de vida.
- A mi hermano Ediberto por ser mi amigo y estar siempre a mi lado.
- Al Dr. Martín Salazar Villanueva por su amistad, orientación y guía fundamental que me brindo durante todo el proceso de investigación.
- A la Vicerrectoría de Investigación y Estudios de Posgrado (VIEP) de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP) por la beca otorgada a lo largo de este trabajo.
- A todos los maestros que formaron parte de mi vida estudiantil ya que gracias a ellos pude desarrollar mejor mis conocimientos.
- A mis amigos que han permanecido conmigo y que me han ayudado a crecer como persona en el ámbito profesional y personal.

Índice

Capítulo I	Pág.
Protocolo de Investigación	4
1.1 Planteamiento del Problema	4
1.2 Justificación	4
1.3 Objetivos	5
Capítulo II	
Introducción	6
Capítulo III	
Marco Teórico	11
3.1 Principales Fuerzas en Mecánica Molecular (MM)	14
3.2 Análisis de Términos de la Ecuación de Energía Potencial (V)	16
3.2.1 Alargamiento	16
3.2.2 Deformación	17
3.2.3 Torsión	19
3.2.4 Términos Cruzados	20
3.2.5 Interacción Electrostática	20
3.2.6 Interacciones de Van der Waals	21
3.3 Parametrización	22
3.4 Propiedades Moleculares	23
3.5 Elementos Químicos	23
Capítulo IV	
Análisis y Validación de Resultados	28
4.1 Representación Geométrica	28
4.2 Estructuras tipo $Al_{12}X_1$	30
4.3 Estructuras tipo $Al_{42}X_{13}$	33
Capítulo V	
Conclusiones	37
Bibliografía y Referencias	38

Capítulo I

Protocolo de Investigación

A través de los tiempos, el manejo de los materiales ha sido de vital importancia para el progreso de las civilizaciones. Los metales, en particular son de gran interés por sus diversas aplicaciones en la industria tales como recubrimientos, soldaduras, elementos de maquinaria, etc.

El justificar las formas estructurales y el comportamiento electrónico de cúmulos de metales de transición representa un gran reto para grupos de investigación teóricos y experimentales.

Los que presentan mayor estabilidad se les denomina números mágicos, los cuales han sido establecidos como los más abundantes para un sistema en particular.

Las propiedades físicas, químicas y de estabilidad pueden ser mejoradas a través de la sustitución de un átomo de Al de la parte central del cubooctaedro, decaedro e icosaedro por uno de los 10 elementos (Metales de Transición) de la tabla periódica. Se han elegido estas geometrías porque han sido identificadas como configuraciones de mínima energía para Al_{13} y Al_{55} , así como para otros cúmulos metálicos.

1.1 Planteamiento del Problema

Encontrar el valor de mínima energía en los cúmulos aleados, con base de Aluminio y en su núcleo los diferentes Metales de Transición a través de la Teoría de Mecánica Molecular (MM).

1.2 Justificación

El sistema aleado que cuente con mayor energía proporcionara mayor estabilidad con respecto al cumulo original, esto se debe a que dichos elementos pueden mostrar grandes momentos magnéticos, es claro que la evolución de la estructura electrónica en los cúmulos compuestos es fundamental.

1.3 Objetivos

Objetivo General

- Obtener la energía total y distancia entre los extremos para los tres tipos de geometrías.

Objetivos Particulares

- Encontrar la estructura de mínima energía para el caso puro en las tres geometrías.
- Encontrar la estructura de mínima energía para las aleaciones de Aluminio.

Capítulo II

Introducción

Durante las dos últimas décadas numerosos esfuerzos teóricos y experimentales se han dedicado al estudio de las propiedades estructurales, electrónicas, ópticas y magnéticas de las agrupaciones atómicas. Éstas son denominadas como cúmulos y son claramente diferentes de los materiales en bulto, además de cambiar drásticamente con el aumento de tamaño del cúmulo.¹ Cabe señalar que el estudio de la estructura de los sistemas amorfos en relación con el tamaño del cúmulo es un requisito previo para la comprensión de sus propiedades físicas y químicas especiales.¹

Es de destacar que la investigación sobre las nano-estructuras (cúmulos) dopadas, es un punto importante para los científicos ya que las propiedades electrónicas y ópticas podrían ser diseñadas y/o modificadas mediante la introducción de diferentes elementos.² Se ha encontrado que el proceso de dopaje induce una deformación local en las longitudes de enlace cerca del sitio dopado. El Análisis de Orbitales es de gran ayuda para poder examinar las propiedades estructurales de los cúmulos.²

Por otro lado, uno de los elementos que atrae la atención científico-tecnológica es el aluminio, debido a que es un metal muy común y se ha encontrado diversas aplicaciones en la vida cotidiana, el poder analizar la estabilidad energética y estructural de cúmulos pequeños compuestos por átomos de aluminio depende de los diversos isómeros que contenga, un tema que ha sido estudiado en años recientes.³

Los cúmulos de aleación de aluminio proporcionan interés en las materias puras y ciencias aplicadas, campos tradicionales de la física y la química.⁴

Actualmente en la ingeniería química catalítica, los catalizadores reales consisten principalmente en un sistema heterometálico o bimetálico, que puede mejorar profundamente la reactividad y selectividad. Por lo tanto, para obtener una comprensión más profunda del comportamiento microscópico de estas especies, el estudio de los cúmulos de aluminio proporciona una herramienta útil.⁴

Entre las diversas aplicaciones del aluminio podemos mencionar por ejemplo las cerámicas de Nitruro de Aluminio (AlN) las cuales tienen propiedades físicas y químicas excelentes, tales como alta termo-conductividad, bajo coeficiente térmico-inflado y gran brecha de

energía, características que han atraído la atención de físicos, químicos y científicos de materiales, dado que los cúmulos de materiales ensamblados pueden tener propiedades poco comunes, la evolución de la estructura electrónica en los cúmulos compuestos es indispensable.⁵

Un ejemplo característico de las agrupaciones atómicas son los cúmulos de aluminio ya que han sido objeto de muchos estudios teóricos y experimentales, los cuales indican que la estabilidad de los pequeños cúmulos Al_n puede explicarse utilizando el modelo jellium, debido a que los electrones de valencia del Al se encuentran libres.¹

Es importante mencionar que se ha prestado mucha atención a los cúmulos de aluminio dopado, entre los cuales encontramos elementos como los no metales, metales reactivos y metales de transición, estos últimos han sido considerados como principales sustitutos para buscar cúmulos de aluminio dopado estables. Entre los diferentes cúmulos de Al dopados, vemos que los dopados con metales de transición (TM) han sido cada vez más sólidos, esto se debe a que dichos elementos pueden mostrar inusualmente grandes momentos magnéticos locales cuando son absorbidos y/o integrados en la superficie de un metal SP.¹

Con la finalidad de obtener más conocimientos acerca de la naturaleza magnética de cúmulos MAl_n , se han implementado análisis detallados de las cargas atómicas en el sitio y momentos magnéticos locales, sin olvidar que este último disminuye gradualmente en varios metales de transición.¹

Principalmente el interés recae sobre las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de los metales de transición dopado con cúmulos de Al, teniendo en cuenta que los cálculos spin-densidad se realizan para una amplia gama de átomos dopantes 3d y MAl_n , información que nos da una idea clara sobre cómo cambiar las propiedades magnéticas y como los electrones locales de un átomo aislado empiezan a desenlazar en cúmulos MAl_n , debido a lo anterior se ha incrementado el conocimiento de las causas del magnetismo en las agrupaciones MAl_n que varía con el aumento de tamaño del cúmulo.¹

Cabe señalar que todos los cálculos se realizaron para el isómero más estable de cada cúmulo aplicando la Teoría Funcional de Densidad Electrónica (DFT).^{1,3}

A fin de obtener las estructuras más bajas de energía de los cúmulos de MAl_n , cierta cantidad de posibles estructuras iniciales se consideran para cada tamaño.¹ Por ejemplo para los cúmulos MAl_{12} , se han considerado todas las configuraciones para un átomo M

incluyendo icosaedro, cubooctaedro y decaedro teniendo como conclusión que las estructuras más bajas de energía para los cúmulos MAI_{12} son de la forma icosaedro.¹

Es importante saber que la brecha HOMO-LUMO es una magnitud característica de la estructura electrónica de los cúmulos, de igual modo la capacidad de estos al someterse a ciertas reacciones químicas activadas por moléculas pequeñas. Para poder investigar la unión de varios cúmulos MAI_n en relación con los orbitales moleculares debemos examinar la contribución de los diferentes componentes orbitales (s, p, d) y la densidad de electrones de los estados HOMO y LUMO.¹

Por otra parte recientemente la adsorción de hidrógeno en nano-estructuras (cúmulos) ha llamado la atención en estudios experimentales y teóricos ya que dicho elemento es una fuente principal de energía para el futuro, esta concentración en superficies metálicas ofrece la oportunidad de adquirir una comprensión básica de muchos problemas interesantes, como los procesos catalíticos, almacenamiento de hidrógeno, entre otros.⁴

En resumen, se ha estudiado el comportamiento de crecimiento, estabilidad y propiedades electrónicas y magnéticas de cúmulos de MAI_n mediante la Teoría Funcional de Densidad Electrónica (DFT), el análisis de estabilidad en las diferencias de energía y la energía de unión de segundo orden, estudios que muestran como los cúmulos MAI_3 tienen relativamente mayor estabilidad. Conjuntamente, el análisis de las brechas HOMO-LUMO en los cúmulos MAI_n indica que las agrupaciones MAI_{12} tienen pequeñas lagunas HOMO-LUMO.¹

Basados en esta información podemos afirmar que el resultado de las investigaciones demuestra que el magnetismo de los cúmulos de aluminio dopados es altamente dependiente de los electrones 3d de los metales de transición.¹

A continuación mencionaremos algunos de los recientes trabajos internacionales que han contribuido a éste conocimiento.

Mei Wang et al, han realizado estudios sobre las Propiedades Estructurales, Electrónicas y Magnéticas de una serie de cúmulos de aluminio dopado con varios metales de transición. En donde podemos ver que las geometrías, propiedades electrónicas y magnéticas de MAI_n (M = Cr, Mn, Fe, Co, Ni; n = 1-7, 12) han sido investigadas sistemáticamente en el marco del gradiente y teoría funcional de densidad. Se explica cómo los cúmulos de MAI_n tienen geometrías similares a la de cúmulos de Aln_1 , además de que MAI_3 poseen relativamente mayor estabilidad.

Llegamos a la conclusión de que los momentos magnéticos totales calculados de las estructuras más bajas de energía oscilan con el tamaño del cúmulo, y muestra que los electrones 3d juegan un papel dominante para el magnetismo del sistema.

Ling Guo et al, elaboraron una Investigación Teórica de la Adsorción de Hidrógeno Molecular y la disociación en Al_nV donde explicaron como la reacción de Al_nV con H_2 produciría Al_nVH_2 debido a grandes cambios exotérmicos de energía y relativamente pequeñas energías de activación que podrían servir como catalizadores altamente eficientes y de bajo costo para la disociación de hidrógeno. Exploraron la posibilidad de llevar a cabo adsorción de hidrógeno sobre el cúmulo de aleación Al_nV a través de examinar la energía de reacción, barrera de activación y mecanismos de reacción Finalmente en la comparación de la dureza de los cúmulos Al_nV y Al_nVH_2 , existe una correlación entre ellos que puede atribuir a los pequeños cambios en la estructura geométrica cuando se añaden los átomos de hidrógeno.

Zhen - Yi Jiang et al, estudiaron La Estructura, Geometrías, Estados Electrónicos y la Estabilidad de los cúmulos de Nitrógeno dopados con Aluminio Al_nN ($N = 2-9$) utilizando la Teoría Funcional de Densidad Electrónica (DFT), encontrando que la electronegatividad del nitrógeno es más grande que la del aluminio, lo cual genera que el átomo de N trabaje como el aceptor de electrones.

Xiaoyu An et al, realizaron un estudio DFT del Mecanismo Oxidación CO en Al_nAu con $n = 1 - 12$ de donde se demostró que la mezcla de dos metales diferentes como por ejemplo Al y Au puede tener efectos beneficiosos sobre las actividades catalíticas y descubrieron que el cúmulo $Al_{11}Au$ se propone como un nano-catalizador eficaz.

Ehsan Shakerzadeh et al, crearon un estudio teórico comparativo de las características ópticas, estructurales, electrónicas y no lineales de nano-cúmulos $B_{12}N_{12}$ y $Al_{12}N_{12}$. Esta investigación arroja resultados que pueden ser importantes para futuros dispositivos a nano - escala y el diseño de nuevos materiales.

Yusuf Erdogan et al, han hecho grandes aportaciones como por ejemplo la Evolución de las Propiedades y Estructura Electrónica de los nano-cúmulos de Titanio dopados de Aluminio mediante cálculos basados en la Teoría Funcional de Densidad Electrónica (DFT). Recordando que la brecha de energía HOMO-LUMO, el Potencial de Ionización (PI), Afinidad Electrónica (EA), Afinidad Adiabática Electrónica (AEA), Afinidad Vertical

Electrónica (VDE) y la Energía Vertical de Desprendimiento (VDE) también se calculan para el isómero más estable de cada cúmulo.

Uno de los principales objetivos de estas actividades de investigación es explorar los patrones evolutivos de tamaño desde lo molecular hasta el régimen de fase condensada. Podemos concluir que los cúmulos compuestos por átomos de aluminio han sido tema de estudio en las dos últimas décadas.

Capítulo III

Marco Teórico

La química computacional es un área del conocimiento moderno, ya que requiere de individuos preparados especialmente para desarrollarla, un químico computacional debe tener conocimientos sólidos de química experimental, ya que el experimento califica sus resultados, si estos difieren, este debe de poder encontrar el origen de la diferencia, poseer intuición propia de investigador y entender e interpretar resultados experimentales.

Los desarrollos de la química computacional pueden ser analizados a través de las revistas especializadas entre las que podemos destacar: *The Journal of Chemical Information and Computer Science*, que inicio su publicación en 1960, *Internacional Journal of Quantum Chemistry*, comenzó en 1967, *Journal of Molecular Structure* en 1967, etc.

En los años sesenta la mecánica cuántica proporciono a los químicos modelos cuantitativos para el cálculo de propiedades moleculares que pudieron incorporarse a las computadoras, solo que se limitaban al estudio de sistemas electrónicos de moléculas aromáticas, lo cual puede ser el origen de la química computacional en el sentido más estricto, el profesor Pople inicio el desarrollo de los métodos semi-empíricos, que junto con las reglas de Woodward y Hoffman, demostraron la necesidad de considerar las propiedades de simetría de las funciones de onda y su relación con los efectos electrónicos.

En contraste, los métodos sustentados en la mecánica molecular se desarrollaron muy rápido como una herramienta útil para determinar propiedades geométricas, fundamentalmente. La mecánica molecular requirió de menor tiempo de cómputo y se apoyó en el desarrollo de análisis conformacional, sustentado en principios como la tensión angular de Bayer propuesta en 1884, la tensión de Pitzer en los años treinta y la utilización de términos que permiten incorporar cuantitativamente los efectos atractivos y repulsivos asociados a los efectos estéricos; de esta forma Hendrickson empleo una computadora por primera vez para calcular los esqueletos básicos de muchos compuestos orgánicos, todos cíclicos, y Wiberg implemento un método de coordenadas cartesianas para efectuar optimización de geometrías.

Al mismo tiempo, John Pople, denominado el padre de la química computacional de aplicación generalizada, creo el programa para efectuar cálculos Gaussian 70 en donde

introdujo el concepto de química modelo, que consiste en un modelo teórico independiente y aplicable de manera uniforme para predecir las propiedades de sistemas químicos.

El objetivo de la química computacional es modelar la química real, teniendo limitaciones inherentes, conforme los modelos se vuelven más sofisticados, se aproximan más a la química real, aunque los métodos más precisos hoy en día incorporan correcciones empíricas como en el caso de los modelos G1, G2 y G3. Se estima que una tercera parte del súper cómputo mundial se consume en el cálculo de la estructura electrónica de las moléculas.

El uso de la química modelo se basa en el siguiente principio:

Un modelo teórico debe ser aplicable en forma uniforme a cualquier sistema molecular, independientemente de su tipo y tamaño, siendo la capacidad de cómputo la única limitante que debe imperar.

Al mismo tiempo este principio tiene dos implicaciones:

- Un modelo teórico debe estar únicamente definido para una configuración determinada de núcleos y electrones.
- No debe emplear preconcepciones específicas para enfrentar un problema determinado.

La implementación de los modelos teóricos al cómputo es denominada química teórica modelo o simplemente modelo químico; una vez que se ha definido un modelo teórico, se procede a su implementación computacional y se evalúa con una amplia gama de sistemas químicos cuyas propiedades han sido determinadas experimentalmente.

Un modelo químico se caracteriza por mostrar consistencia de tamaño, tener cierta variación, debe ser posible implementarlo empleando recursos de cómputo accesibles y además reproducir cuantitativamente los resultados experimentales conocidos o por lo menos predecir cuantitativamente las tendencias de las variaciones en las propiedades de un grupo de sistemas moleculares.

Una química modelo en el sentido de Pople se caracteriza por la combinación de un procedimiento teórico y un conjunto de base; el otro componente de la química teórica es la

base de cálculo o simplemente la base que permite obtener una representación de los orbitales de un sistema químico.

Existe la convención para describir los modelos químicos empleados en un cálculo de la manera siguiente:

Método para calcular la energía / conjunto de base // método de optimización de la geometría / conjunto de base.

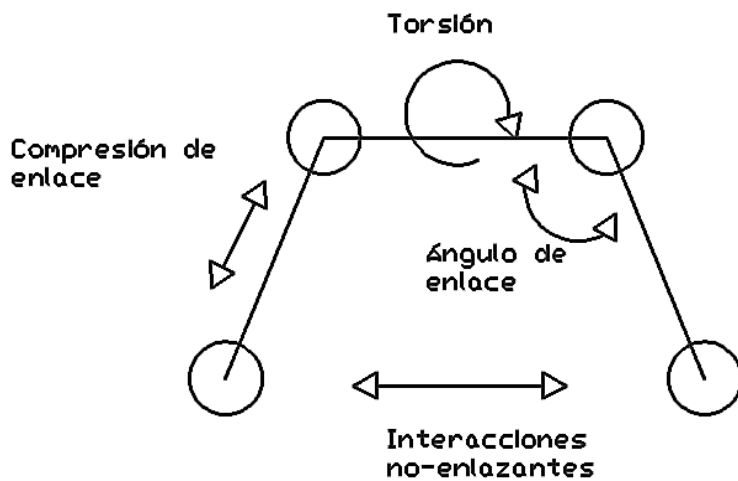
Dónde el modelo colocado a la derecha de la doble diagonal indica la manera con el que se optimiza la geometría, mientras que el modelo descrito a la izquierda es aquel con el que se calcula la energía del sistema molecular en estudio.

Los métodos de mecánica molecular (MM) no están basados en la mecánica cuántica ya que no tiene relación con el hamiltoniano electrónico ni con la función de onda y tampoco con la densidad electrónica, sino más bien en las leyes de la mecánica clásica, y usan como modelo una molécula compuesta por átomos unidos por enlaces que se pueden comparar con resortes.

A partir de varios parámetros como las constantes de fuerza de alargamiento del enlace y de la introducción de términos que permiten considerar interacciones entre los átomos no enlazados, el método construye una expresión para la energía potencial que es función de las posiciones atómicas $V(x, y, z)$. Por medio de la minimización de esta función, para varios conformeros moleculares, los métodos de MM predicen geometrías en el equilibrio y energías relativas.

En estos métodos se analizan las contribuciones a la energía potencial de las moléculas debidas a: alargamiento de enlace V^{alar} , deformación del ángulo de enlace V^{def} , deformación fuera del plano V^{oop} , rotación interna alrededor de un enlace, también llamada torsión V^{tor} , interacciones entre estas clases de movimientos que producen el término cruzado V^{cruz} , atracciones y repulsiones de Van der Waals entre los átomos no enlazados V^{vdw} e interacciones electrostáticas entre los átomos V^{elec} .

La suma de estas contribuciones produce la energía potencial V , para una conectividad y conformación molecular determinada.

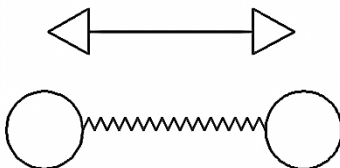


Esquema de los términos que forman el potencial total.

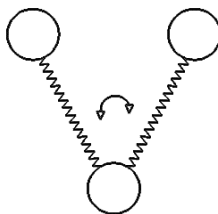
3.1 Principales Fuerzas en Mecánica Molecular (MM)

$$V = V^{alar} + V^{def} + V^{oop} + V^{tor} + V^{cruz} + V^{vdw} + V^{elec}$$

Σ enlace V^{alar}

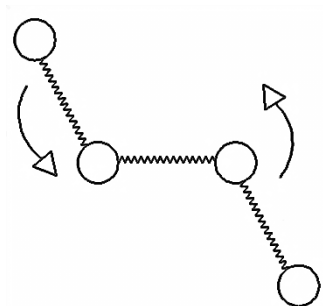


Σ ángulo V^{def}

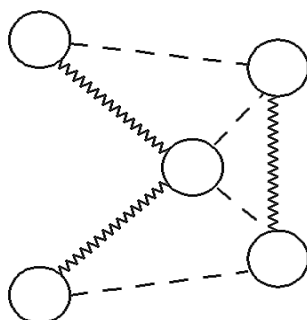


Energía (V) =

Σ ángulo diedro V^{tor}



$$\Sigma \text{ enlace } V^{vdW} + V^{elec}$$



Las expresiones para cada término de la ecuación anterior definen lo que se llama campo de fuerzas en mecánica molecular y las derivadas de la energía potencial determinan las fuerzas que actúan en cada átomo.

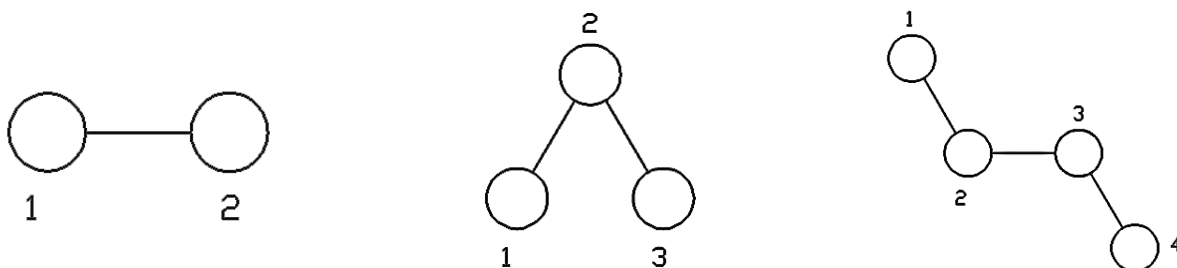
Cada campo de fuerzas en mecánica molecular asigna un número (código) a cada átomo en la molécula según el tipo al que pertenece y en función de su número atómico, carga y ambiente molecular, cada tipo corresponde a diferentes características y comportamiento; los diferentes campos de fuerza contienen diversos números y clases de tipos de átomos a partir de las decisiones hechas por los autores, como por ejemplo:

Código	Tipo	Descripción
1	C	Csp^3
2	C	Csp^2
5	H	H
7	O	Oxígeno de carbonilo

Tipos de hibridaciones que se consideran para generar un campo de fuerza.

En un cálculo de mecánica molecular se deben especificar no sólo las coordenadas atómicas iniciales, como en los cálculos semi-empíricos, sino también a la conectividad, es decir determinar a qué átomo o átomos está unido cada molécula, de tal manera que se pueda clasificar correctamente por su tipo; para asignarle los parámetros adecuados y con ellos construir en forma adecuada la expresión matemática por resolver.

La conectividad se puede expresar con las relaciones siguientes: átomos 1,2 están unidos el uno al otro; átomos 1,3 están separados por dos enlaces; átomos 1,4 están separados por tres enlaces, etc.



Los diferentes campos de fuerza utilizan conjuntos de parámetros ajustables, fundamentalmente constantes de fuerza, datos atómicos y valores estructurales de geometrías en equilibrio para que calculadas se acerquen lo más posible a las geometrías experimentales.

La mecánica molecular funciona bajo el supuesto de que estos parámetros y las constantes de fuerza pueden transferirse de una molécula a otra, es decir, que los parámetros de cada tipo de átomo son los mismos en cualquier ambiente; para que un campo de fuerza sea útil y proporcione resultados confiables, es necesario que los parámetros de fuerza sean transferibles completamente de una molécula a otra. Los valores geométricos al equilibrio (longitudes de enlaces, ángulos de enlace y ángulos diedros) y demás parámetros se usan para otros compuestos similares más complejos, los parámetros son característicos de cada átomo y se denotan con las letras mayúsculas (I, J) y los átomos en la molécula con (i, j).

3.2 Análisis de Términos de la Ecuación de Energía Potencial (V)

3.2.1 Alargamiento

La energía potencial de alargamiento del enlace V^{alar} es tomada como la suma de las energías potenciales V_{ij}^{alar} para el alargamiento de cada enlace en la molécula

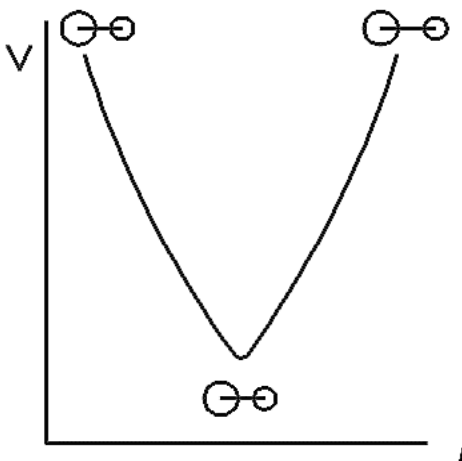
$V^{alar} = \sum_{i,j} V_{ij}^{alar}$, donde la suma es sobre todos los pares de átomos directamente

enlazados (relación 1,2). La elección más simple para modelar el término V_{ij}^{alar} es el uso

de la aproximación del oscilador armónico en donde V_{ij}^{alar} es una función cuadrática del desplazamiento o alargamiento de enlace, I_{ij} de la longitud de referencia natural I_{ij}^0 esto es:

$$V_{ij}^{alar} = \frac{1}{2} k_{IJ} (I_{ij} - I_{IJ}^0)^2$$

La constante de fuerza k_{IJ} y la longitud de referencia I_{IJ}^0 dependen del tipo de los átomos enlazados, esta ecuación representa una parábola, entre más alejada este la longitud de enlace del valor de equilibrio, mayor será la energía del enlace. La constante de fuerza k_{IJ} es la dureza del resorte o el costo energético que implica desviarlo de su valor de equilibrio I_{IJ}^0 (distancia entre los núcleos atómicos en la configuración de mínima energía).



Potencial debido al término de alargamiento.

3.2.2 Deformación

La energía potencial V^{def} es debida a la deformación del ángulo de enlace entre tres átomos (relación 1,3) que es considerada como la suma de las energías potenciales V_{ijk}^{def}

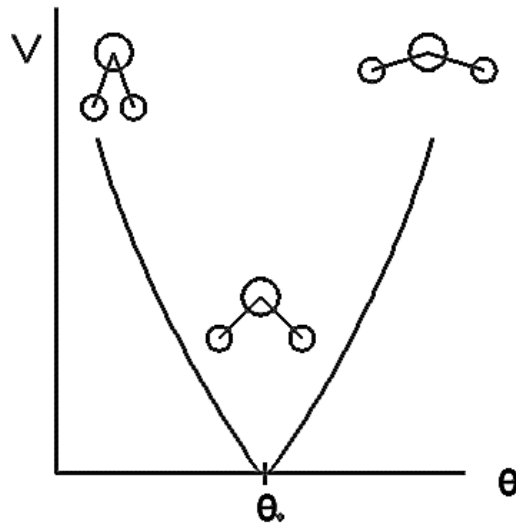
para la deformación de cada ángulo de enlace de la molécula $V_{ijk}^{def} = \sum_{ijk}^{1-3} V_{ijk}^{def}$, donde

la suma corre sobre todos los ángulos de enlace que tiene la molécula.

En este caso se calcula la energía asociada a la vibración de apertura o cierre alrededor del ángulo de enlace en el equilibrio. La elección más simple para calcular V_{ijk}^{def} es con una función cuadrática:

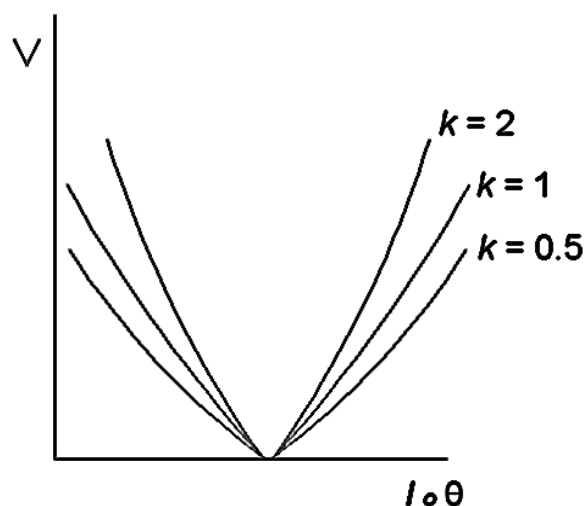
$$V_{ijk}^{def} = \frac{1}{2} k_{IJK} (\theta_{ijk} - \theta_{IJK}^0)^2$$

Dónde θ_{IJK}^0 es el valor de referencia para el ángulo de tipo IJK, es decir, el valor del ángulo en el punto de mínima energía.



Potencial debido a la optimización del ángulo.

La constante k_{IJK} controla la flexibilidad del ángulo que forman tres átomos directamente unidos. Tanto en el caso del alargamiento de un enlace como en la deformación del ángulo, el valor de las constantes de fuerza k_{IJ} y k_{IJK} hace más o menos amplia la parábola que define a la energía de la interacción, mientras sea mayor el valor de la constante, mayor es la energía requerida para deformar el ángulo o enlace de su valor de equilibrio.



Diferentes valores de constantes para la optimización del ángulo.

3.2.3 Torsión

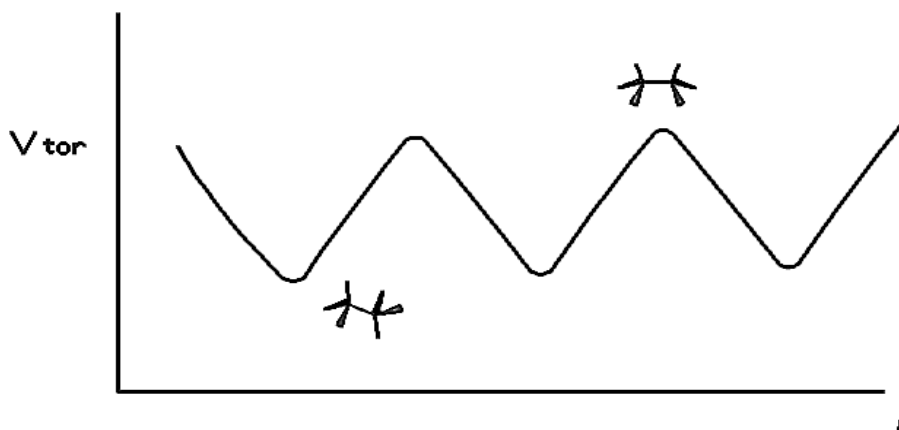
El término V^{tor} es tomado de la suma de los términos V_{tor}^{jkl} sobre todos los pares de

átomos con relación 1-4, $V^{tor} = \sum_{ijkl}^{1,4} V_{ijkl}^{tor}$. La energía V_{tor}^{jkl} se relaciona con la

rotación alrededor del enlace i-j en una secuencia de cuatro átomos i-j-k-l. La expresión usada con más frecuencia para V_{ijkl}^{tor} es la serie de Fourier truncada:

$$V^{tor} = \frac{1}{2} \sum_{n=1} V_n [1 + \cos(n\Phi - \Phi^0)]$$

El parámetro n determina la periodicidad, ejemplo n = 1 describe una rotación de que es periódica en 360°, las constantes V_n determinan el tamaño de la barrera rotacional alrededor del enlace i-j, y dependen del tipo de los átomos, Φ es el ángulo diedro en la secuencia de átomos i, j, k, l.



Potencial debido al término de torsión.

3.2.4 Términos Cruzados

Los términos cruzados V^{cruz} en la expresión de V representan acoplamientos entre los términos de alargamiento, deformación y movimiento de torsión, para permitir estas interacciones se adiciona un término cruzado de alargamiento-deformación con la forma $\frac{1}{2}k_{12}(\Delta l_1 + \Delta l_2)\Delta\theta$, donde $\Delta l_1, \Delta l_2$ y $\Delta\theta$ son las desviaciones de los enlaces y los ángulos de los valores de referencia.

Los términos cruzados más usados son los de alargamiento - deformación y alargamiento - alargamiento para dos enlaces del mismo átomo, así como alargamiento - torsión, deformación - torsión y deformación - deformación para dos ángulos con el mismo tipo de átomo central.

3.2.5 Interacción Electroestática

El término electrostático V^{elec} se toma como la suma de las interacciones electrostáticas que involucran todos los pares de átomos excepto los pares con relación 1 - 2 y 1 - 3:

$$V^{elec} = \sum_{ij \neq 1-2, 1-3} V_{ij}^{elec} \text{ donde los átomos } i \text{ y } j \text{ tienen una relación } 1 - 4 \text{ o mayor, } V_{ij}^{elec} \text{ se}$$

calcula usando la expresión de la energía de interacción electrostática (coulombica):

$$V_{elec} = \frac{Q_i Q_j}{E_r R_{ij}}$$

Donde E_r es la constante dieléctrica del medio y R_{ij} la distancia entre los átomos.

3.2.6 Interacciones de Van der Waals

El término de Van der Waals usualmente se toma de las interacciones que involucran todos los pares de átomos posibles con relación 1 - 4, 1 - 5 etc. y se calcula como

$$V^{vdW} = \sum_{i,j>1-4} V^{vdW}$$

Las interacciones de Van der Waals y electrostáticas entre átomos con una relación 1 - 2 y 1 - 3 se consideran incluidas en forma implícita en los parámetros de alargamiento y deformación.

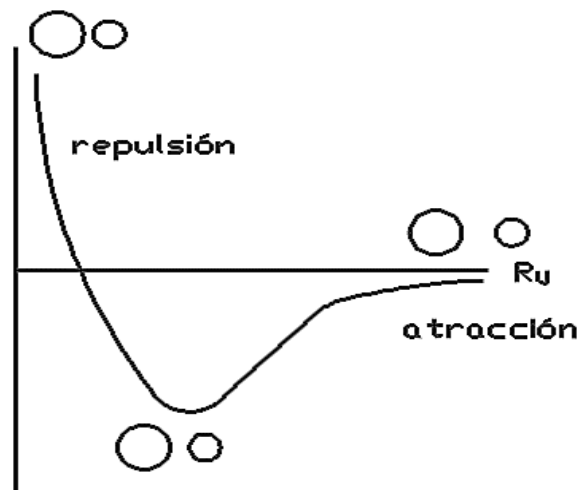
Cada término de V^{vdW} es la suma de la atracción debida a las fuerzas de dispersión de London y de repulsión de Pauli, los campos de fuerzas calculan el término V^{vdW} como el potencial de Lennard - Jones 12 - 6 que tiene la forma:

$$V^{vdW} = E_{IJ} \left[\left(\frac{R_{IJ}^*}{R_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{IJ}^*}{R_{ij}} \right)^6 \right]$$

Donde R_{ij} es la distancia entre los átomos i y j , el parámetro E_{IJ} es el valor de la energía V^{vdW} en el mínimo de la curva de interacción y el parámetro R_{IJ}^* da el valor de la distancia R_{ij} en el mínimo de la energía potencial $V^{vdW}(E_{IJ})$.

Las interacciones de Van der Waals son llamadas interacciones de no enlace y consumen la mayor parte del tiempo de computo ocupado en el cálculo de V de una molécula grande, para acelerar los cálculos de MM en moléculas grandes muchos programas truncan las sumas, omitiendo pares de átomos que se encuentran a distancias mayores de un valor determinado. A continuación se muestran las interacciones de no enlace y se caracterizan

por una curva con un mínimo cuya profundidad está relacionada con E_{II} y cuya pendiente caracteriza a la interacción (atractiva o repulsiva) entre los átomos en cuestión.



Potencial debido al termino de interacciones de Van der Waals.

3.3 Parametrización

Los parámetros de los programas de MM se refieren a los valores que toman las constantes de fuerza y los valores geométricos al equilibrio. La calidad del campo de fuerza o la precisión de sus predicciones depende tanto de las funciones que describen la energía como de sus parámetros.

Esta parametrización se realiza en varias etapas, primero se determinan los valores ideales y la penalización energética por la desviación respecto de estos valores, mediante el uso de la información experimental o cálculos, posteriormente, este conjunto de parámetros iniciales conocido como conjunto de prueba sirve para minimizar las desviaciones de las propiedades moleculares predichas por los cálculos de MM.

Más adelante, por un proceso iterativo se corrige el conjunto de prueba y se compara de nuevo con las referencias experimentales hasta que la diferencia sea mínima.

Los parámetros se determinan en los sistemas más simples donde actúa el menor número de fuerzas y se trasladan a moléculas mayores por medio de la propiedad de transferibilidad. Las propiedades usadas en la parametrización del campo de fuerza incluyen: estructuras

moleculares, diferencias de energía conformacionales, frecuencias vibracionales, barreras de rotación interna, momentos dipolares e interacciones intermoleculares.

3.4 Propiedades Moleculares

La optimización de geometría por métodos de mecánica molecular inicia con una geometría de partida y tiene como objetivo encontrar un mínimo local de la energía V . Debido a que V posee una expresión analítica, la primera y segunda derivadas pueden ser evaluadas analíticamente, lo cual facilita la minimización de la energía.

Se debe hacer énfasis en que el valor numérico de la energía de equilibrio no tiene un significado físico por sí mismo. El nivel cero de V corresponde a la molécula ficticia, en la cual todas las longitudes de enlace y los ángulos tienen su valor de referencia y donde todas las interacciones torsionales, de Van der Waals y electrostática están ausentes.

Las energías estéricas dependen de cómo se construyó el campo de fuerza y como fue parametrizado. El significado físico en mecánica molecular radica en la diferencia de energía estérica entre dos especies que tienen el mismo número y clase de átomos, así como el mismo número y clase de enlace, de este modo se puede usar la diferencia en la energía estérica para dar significado a la diferencia de energía calculada entre: diferentes conformeros de una misma molécula, diferentes estereo-isómeros de una misma molécula, especies diferenciadas por la rotación alrededor de un enlace, diferentes geometrías de la misma molécula, dos moléculas aisladas y las mismas formando un enlace de hidrogeno. Además la energía estérica puede ser combinada con parámetros de energía de enlaces empíricos para calcular propiedades termodinámicas en fase gaseosa. Si se elige el campo de fuerza y los parámetros adecuados para el sistema en estudio, se pueden obtener resultados muy cercanos a los experimentales.

3.5 Elementos Químicos

Aluminio

Elemento químico metálico blanco plateado, de símbolo Al, número atómico 13, peso atómico 26.9815 (g/mol). El aluminio puro es blando y tiene poca resistencia mecánica,

pero puede formar aleaciones con otros elementos para aumentar su resistencia y adquirir varias propiedades útiles. Las aleaciones de aluminio son ligeras, fuertes, y de fácil formación para muchos procesos de metalistería; son fáciles de ensamblar, fundir o maquinar y aceptan gran variedad de acabados. Por sus propiedades físicas, químicas y metalúrgicas, el aluminio se ha convertido en el metal no ferroso de mayor uso.

El aluminio es el elemento metálico más abundante en la Tierra y en la Luna. Se halla ampliamente distribuido en las plantas y en casi todas las rocas. Es un metal plateado con una densidad de 2.70 g/cm^3 a $20 \text{ }^\circ\text{C}$. El aluminio cristaliza en una estructura cúbica centrada en las caras, con lados de longitud de 4.0495 \AA . El aluminio se conoce por su alta conductividad eléctrica y térmica, lo mismo que por su gran reflectividad.

Es también uno de los productos más importantes en la construcción industrial. El transporte constituye el segundo gran mercado. En la industria aeroespacial, el aluminio constituye un 80% del peso del avión. Existen cientos de aplicaciones químicas del aluminio y sus compuestos.

Cromo

Elemento químico de símbolo Cr, número atómico 24, peso atómico 51.996 (g/mol) ; metal que es de color blanco plateado, duro y quebradizo. Sin embargo, es relativamente suave y dúctil cuando no está tensionado o cuando está muy puro. Sus principales usos son la producción de aleaciones anticorrosivas de gran dureza y resistentes al calor y como recubrimiento para galvanizados. Se encuentra como mineral de cromita.

Sus propiedades mecánicas, incluyendo su dureza y la resistencia a la tensión, determinan la capacidad de utilización. El cromo tiene una capacidad relativa baja de forjado, enrollamiento y propiedades de manejo.

Fierro / Hierro

Elemento químico de símbolo Fe, número atómico 26 y peso atómico 55.847 (g/mol) . El hierro es el cuarto elemento más abundante en la corteza terrestre (5%). Es un metal maleable, tenaz, de color gris plateado y magnético. El hierro es un componente vital de la vida vegetal y animal, y es el material clave de la hemoglobina.

El uso más extenso del hierro (fierro) es para la obtención de aceros estructurales; también se producen grandes cantidades de hierro fundido y de hierro forjado. Entre otros usos del

hierro y de sus compuestos se tienen la fabricación de imanes, tintes y abrasivos. El metal puro no se encuentra a menudo en el comercio, pero por lo general es aleado con carbono u otros metales.

Níquel

Elemento químico de símbolo Ni, número atómico 28 y peso atómico 58.71 (g/mol). Metal duro, blanco plateado, dúctil, algo ferromagnético y maleable. El níquel comercial se emplea en el acero inoxidable y otras aleaciones resistentes a la corrosión. También es importante en monedas como sustituto de la plata. El níquel finamente dividido se emplea como catalizador de hidrogenación. El níquel es un elemento bastante abundante, constituye cerca de 0.008% de la corteza terrestre y 0.01% de las rocas ígneas. El níquel se presenta en pequeñas cantidades en plantas y animales.

Cobre

Elemento químico de símbolo Cu, con número atómico 29, es de color rojizo con un brillo metálico brillante; uno de los metales de transición e importante metal no ferroso. Su utilidad se debe a la combinación de sus propiedades químicas, físicas y mecánicas, así como a sus propiedades eléctricas y su abundancia.

El peso atómico del cobre es 63.546 (g/mol), se caracteriza por su baja actividad química. Un metal comparativamente pesado, el cobre sólido puro, tiene una densidad de 8.96 g/cm³ a 20 °C. Cuenta con una alta conductividad térmica y eléctrica. La fuerza del cobre está acompañada de una alta ductibilidad. Las principales aplicaciones de los compuestos de cobre las encontramos en la agricultura, como pigmentos y catalizadores.

Molibdeno

Elemento químico de símbolo Mo, con número atómico 42 y peso atómico 95.94 (g/mol); es uno de los elementos de transición. Metal gris plateado con una densidad de 10.2 g/cm³, se funde a 2610 °C.

El molibdeno se encuentra en muchas partes del mundo. La mayor parte del molibdeno proviene de minas donde su recuperación es el objetivo primario de la operación. El restante se obtiene como un subproducto de ciertas operaciones del beneficio del cobre.

Paladio

Elemento químico de símbolo Pd, número atómico 46 y peso atómico 106.4 (g/mol). Es un metal blanco y muy dúctil. El paladio soportado sobre carbono o alúmina se emplea como catalizador en ciertos procesos químicos. El uso más frecuente del paladio puro corresponde a los contactos eléctricos para bajo voltaje. El paladio sobresale por el número de metales con que forma aleaciones y generalmente produce soluciones sólidas dúctiles.

Es blando y dúctil y puede fabricarse como alambres finos y placas delgadas. En atmósferas ordinarias, el paladio es resistente al deslustre. A temperatura ambiente el metal tiene la propiedad inusual de absorber hasta 900 veces su propio volumen de hidrógeno.

Plata

Elemento químico de símbolo Ag, número atómico 47 y masa atómica 107.870 (g/mol). Es un metal lustroso de color blanco-grisáceo, es uno de los metales pesados y nobles; desde el punto comercial, es un metal precioso. Su densidad es 10.5 veces la del agua.

En sus aplicaciones, la plata se alea con uno o más metales. La plata posee las más altas conductividades térmicas y eléctricas de todos los metales, y posee la resistencia de contacto más bajo. También se emplea mucho en joyería y piezas diversas. Entre las aleaciones en que es un componente están las amalgamas dentales y metales para cojinetes y pistones de motores.

Tungsteno / Volframio

Elemento químico de símbolo W, de número atómico 74 y peso atómico 183.85 (g/mol). Este metal tiene una estructura cúbica centrada en el cuerpo y brillo metálico gris plateado. Su punto de fusión de 3410 °C es el más alto de los metales. Exhibe una baja presión de vapor, tiene la fuerza más alta a la tracción, una excelente resistencia a la corrosión, alta densidad y gran fuerza a temperaturas elevadas en ausencia de aire, y es extremadamente duro. Es uno de los mejores materiales para herramientas duras, y retiene sus propiedades a altas temperaturas. El tungsteno metálico puro es importante en lámparas eléctricas, productos electrónicos e industria eléctrica.

Platino

Elemento químico de símbolo Pt, número atómico 78 y peso atómico 195.09 (g/mol); es un metal noble blanco, blando y dúctil. Los metales del grupo del platino se utilizan mucho en el campo de la química a causa de su actividad catalítica y de su baja reactividad. Como catalizador, el platino se emplea en las reacciones de hidrogenación, isomerización, deshidratación y oxidación.

Conserva su brillantez y no exhibe película de óxido cuando se calienta, aunque se forma una película fina adherente debajo de los 450 °C. El platino puede ser maquinado en alambres finos y láminas delgadas y, por procesos especiales, en alambres extremadamente finos. El metal no se oxida en el aire. Es insoluble en ácido clorhídrico y nítrico.

Oro

Elemento químico de símbolo Au, número atómico 79 y peso atómico 196.967 (g/mol); es un metal muy denso, blando y de color amarillo intenso. El oro se clasifica como metal pesado y noble; en el comercio es el más común de los metales preciosos. Cerca de tres cuartas partes de la producción mundial del oro se consumen en joyería. Sus aplicaciones industriales, especialmente en electrónica, consumen 10 - 15%. Se funde a 1063 °C y ebulle a 2970 °C.

Es un buen conductor de calor y electricidad. Es el metal más dúctil y maleable. Es uno de los metales menos reactivos químicamente. No pierde lustre, ni se quema al aire. Es inerte en soluciones fuertemente alcalinas y en todos los ácidos puros, menos en el ácido selénico.

Capítulo IV

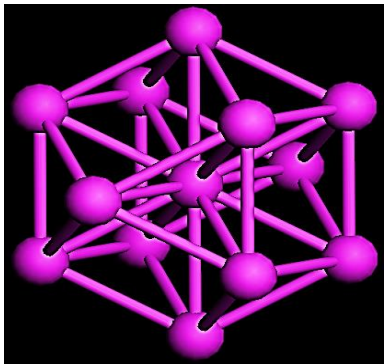
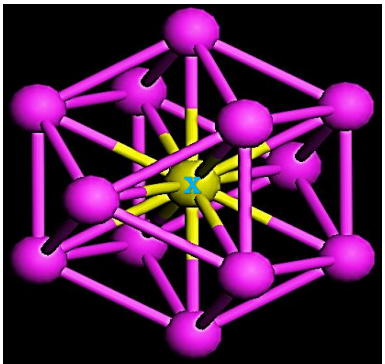
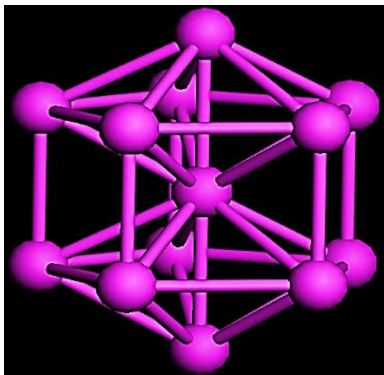
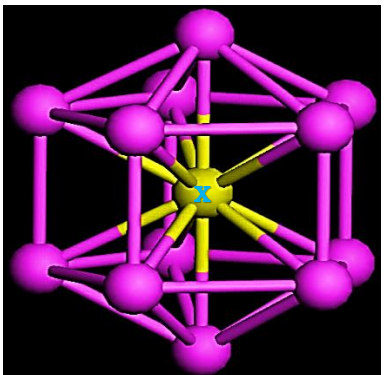
Análisis y Validación de Resultados

A continuación se presenta una discusión sobre los valores obtenidos de los diferentes cálculos realizados y las simulaciones practicadas en el software, presentadas en diferentes tablas y gráficas.

Utilizamos los modelos atómicos siguientes: Al_{13} y $Al_{12}X_1$ para observar las diferencias estructurales entre éstas agrupaciones atómicas y además se consideraron tres formas geométricas que son en total: cubooctaedro, decaedro e icosaedro.

Es decir, primero se optimizó la geometría de cada una de ellas sin sustituir el centro, ya encontrado el estado base se procedió a impurificar el núcleo de éstos sistemas por los elementos químicos (Metales de Transición) de la tabla periódica que son: Cromo (Cr), Hierro (Fe), Níquel (Ni), Cobre (Cu), Molibdeno (Mo), Paladio (Pd), Plata (Ag), Tungsteno (W), Platino (Pt) y Oro (Au).

4.1 Representación Geométrica

Forma Geométrica	Al_{13}	$Al_{12}X_1$
Cubooctaedro		
Decaedro		

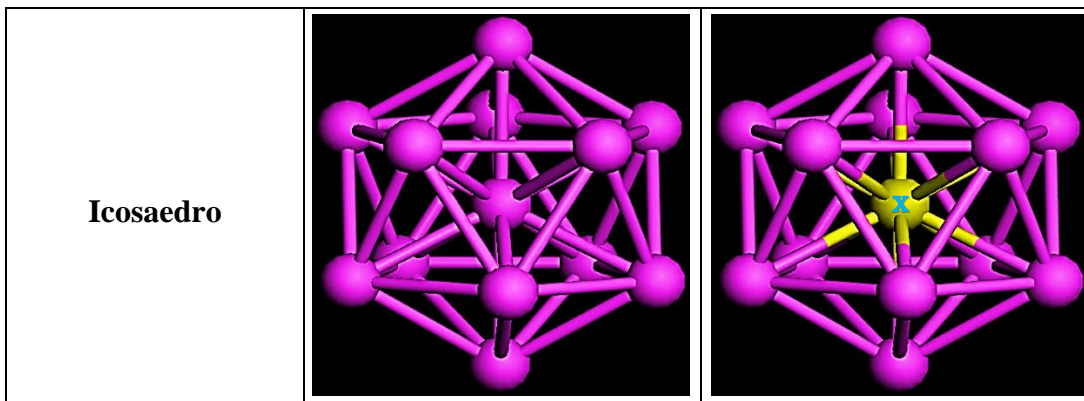
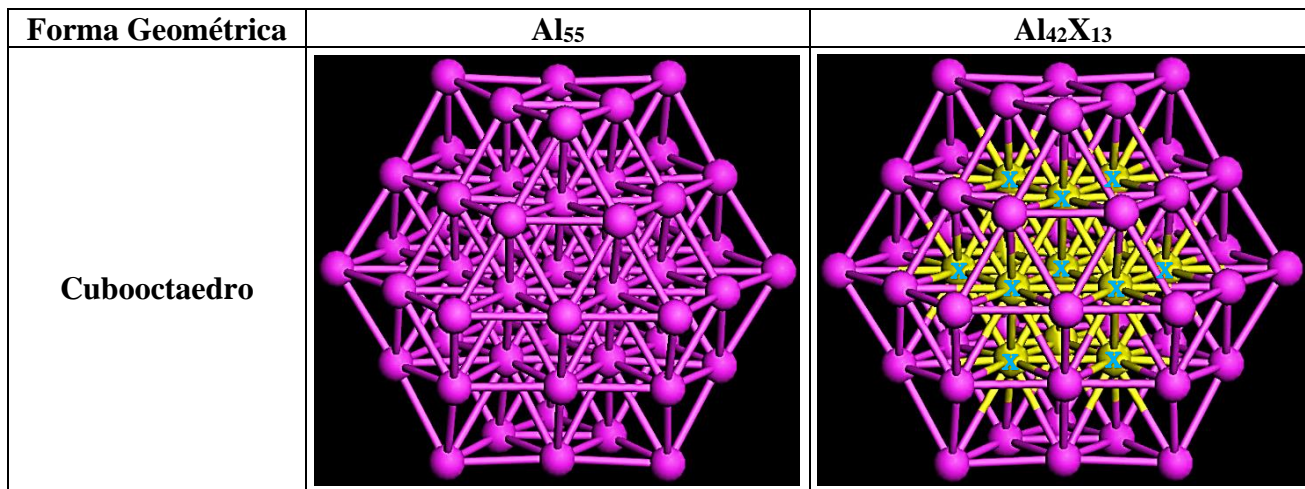


Tabla 1.1. Representación de las tres formas geométricas para el cumulo Al_{13} .

En la tabla 1.1 y 1.2 se exhiben las formas geométricas utilizadas durante el desarrollo de cálculos y simulaciones, es importante resaltar que la diferencia entre ellas es el modelo atómico utilizado, para el primer caso Al_{13} y posteriormente Al_{55} .

Describiendo de una mejor manera las tablas encontramos que en la segunda columna se muestra el cumulo de aluminio (Al_n) en su estado puro y a continuación en la tercera columna encontramos la misma geometría pero ahora con el núcleo alterado por los elementos químicos (Metales de Transición) seleccionados.



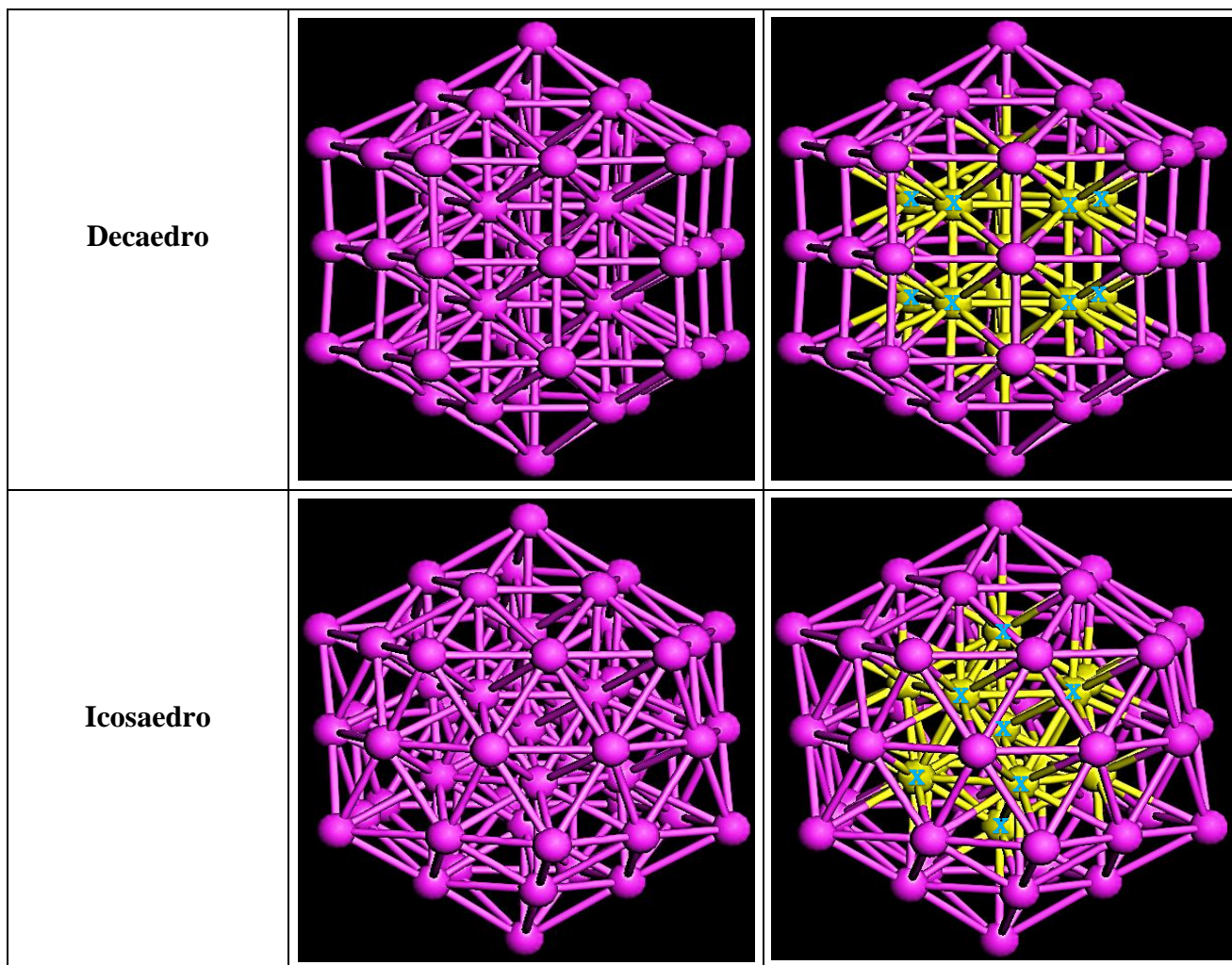


Tabla 1.2. Representación de las tres formas geométricas para el cumulo Al_{55} .

4.2 Estructuras tipo $Al_{12}X_1$

En las siguientes tablas 1.3, 1.4 y 1.5, podemos observar todos los valores obtenidos de los cálculos efectuados, en donde podemos resaltar el comportamiento de los cúmulos de aluminio aleado con los diferentes metales de transición.

Es importante resaltar dos características fundamentales en dichos resultados. La primera es la gran similitud aritmética para las tres formas geométricas, tomando en cuenta que para el Al_{13} existe una notoria diferencia al graficar los puntos de la forma icosaedro.

Por otra parte la tendencia decreciente que presenta el diámetro del cumulo que nos proporciona la conclusión de que a menor diámetro nuestra aleación tendrá una mayor estabilidad.

Elemento (X)	CUBOOCTAEDRO (Al ₁₂ X ₁)		
	Energía Total	Energía / Átomo	Ø Cubo
Al	140.51	10.81	5.90
Cr	150.38	11.57	5.81
Fe	176.85	13.60	5.79
Ni	145.59	11.20	5.80
Cu	141.06	10.85	5.82
Mo	169.16	13.01	5.88
Pd	154.63	11.89	5.86
Ag	144.69	11.13	5.91
W	176.64	13.59	5.89
Pt	166.85	12.83	5.87
Au	154.37	11.87	5.91

Tabla 1.3. Los datos de Energía Total, Energía/átomo están definidos en Kcal/mol; el diámetro de la nanopartícula (Ø) está en Å para el Cubooctaedro Al₁₃.

Elemento (X)	DECAEDRO (Al ₁₂ X ₁)		
	Energía Total	Energía / Átomo	Ø Decaedro
Al	142.64	10.97	6.00
Cr	153.08	11.78	5.96
Fe	179.59	13.81	5.90
Ni	148.39	11.41	5.97
Cu	143.76	11.06	5.98
Mo	171.33	13.18	5.96
Pd	156.93	12.07	5.96
Ag	146.72	11.29	6.00
W	178.75	13.75	5.96
Pt	169.06	13.00	5.95
Au	156.36	12.03	5.99

Tabla 1.4. Los datos de Energía Total, Energía/átomo están definidos en Kcal/mol; el diámetro de la nanopartícula (Ø) está en Å para el Decaedro Al₁₃.

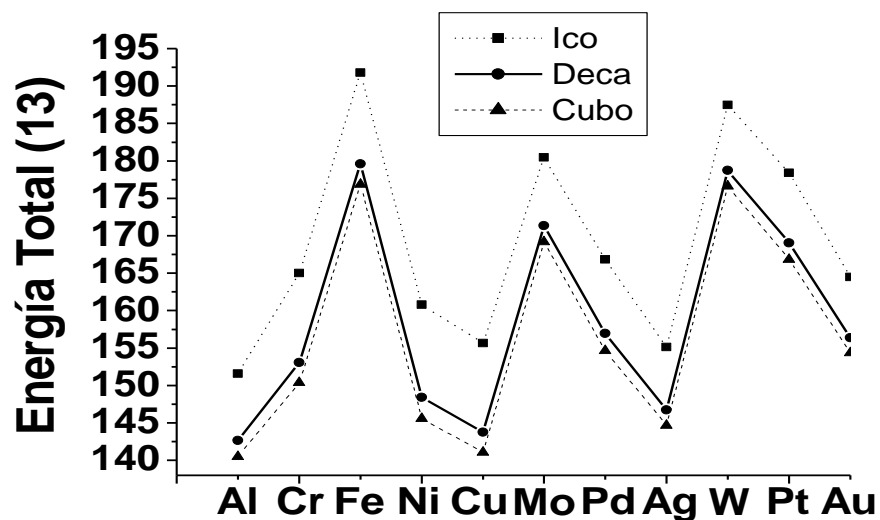
Elemento (X)	ICOSAEDRO (Al ₁₂ X ₁)		
	Energía Total	Energía / Átomo	Ø Icosaedro
Al	151.57	11.66	5.74
Cr	165.02	12.69	5.64
Fe	191.78	14.75	5.65
Ni	160.77	12.37	5.63
Cu	155.67	11.97	5.64
Mo	180.44	13.88	5.75
Pd	166.82	12.83	5.72
Ag	155.15	11.93	5.77
W	187.48	14.42	5.77
Pt	178.42	13.72	5.74
Au	164.46	12.65	5.78

Tabla 1.5. Los datos de Energía Total, Energía/átomo están definidos en Kcal/mol; el diámetro de la nanopartícula (Ø) está en Å para el Icosaedro Al₁₃.

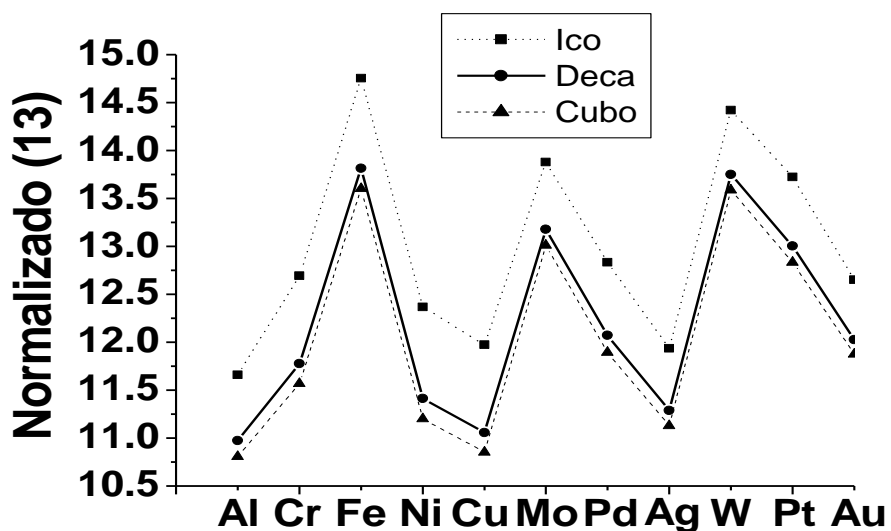
De las gráficas 1.1 y 1.2, se puede apreciar que todos los elementos que sustituyen el centro o coraza del cumulo aleado en análisis aumentan la estabilidad del sistema original, muy por encima en la mayoría de los casos.

Para la familia compuesta por Cr, Mo y W incrementa la estabilidad a medida que aumentan los niveles energéticos de éstos elementos: 3d, 4d y 5d, dichos metales forman los picos máximos de ambas gráficas. Sin embargo el Fe es el que le otorga la mayor estabilidad con un $\Delta E = 0.21$ Kcal/mol que es un valor muy pequeño, sin embargo se asocia ésta diferencia en la tendencia antes mencionada debido a que el hierro maneja valencias 2+ y 3+, y el Al -3 y por lo tanto la afinidad en valencias incrementa drásticamente la estabilidad. Comportamiento similar pero para los elementos que hacen al sistema de menor estabilidad son: Cu, Ag y Au. Podemos deducir que entre mayor sea el nivel energético mayor será la estabilidad de los cúmulos aleados (3d, 4d y 5d). Como es sabido, los anteriores elementos son los denominados metales nobles. Cada uno de ellos les falta un electrón para completar su capa electrónica, ésta capacidad de maleabilidad es transferida a los cúmulos formados por ellos en el centro y capa externa de aluminio.

También es imprescindible mencionar que los puntos medios o de transición son debidos a la familia formada por los elementos: Ni, Pd y Pt. La tendencia energética de igual forma ésta definida por los niveles energéticos de cada uno de ellos (3d, 4d y 5d).



Gráfica 1.1. Energía Total definida en Kcal/mol para Al₁₃.



Gráfica 1.2. Energía/átomo definida en Kcal/mol para Al₁₃.

4.3 Estructuras tipo Al₄₂X₁₃

Continuando con el análisis ahora encontramos las tablas 1.6, 1.7 y 1.8, de donde la principal diferencia radica en el tamaño del cumulo de Aluminio, ya que en este proceso utilizamos el modelo atómico Al₅₅.

Los valores encontrados tuvieron una variación con respecto al caso anterior, el ejemplo más claro fue el diámetro que aumentó aproximadamente un 60% para el cubooctaedro y un 95% para el decaedro e icosaedro, esta situación nos da una idea clara de la diferencia de tamaños existente entre formas geométricas.

Observamos que la tendencia en los resultados obtenidos es similar a los del Al_{13} , sin embargo podemos notar que la energía total aumenta drásticamente, esto generado como consecuencia del aumento de tamaño de la agrupación atómica.

Elemento (X)	CUBOOCTAEDRO ($Al_{42}X_{13}$)		
	Energía Total	Energía / Átomo	Ø Cubo
Al	950.35	17.28	9.48
Cr	1140.04	20.73	9.14
Fe	1737.20	31.59	9.06
Ni	1059.08	19.26	9.10
Cu	966.72	17.58	9.17
Mo	1498.13	27.24	9.39
Pd	1200.97	21.84	9.34
Ag	1023.65	18.61	9.52
W	1665.69	30.29	9.42
Pt	1448.52	26.34	9.37
Au	1200.83	21.83	9.53

Tabla 1.6. Los datos de Energía Total, Energía/átomo están definidos en Kcal/mol; el diámetro de la nanopartícula (Ø) está en Å para el Cubooctaedro Al_{55} .

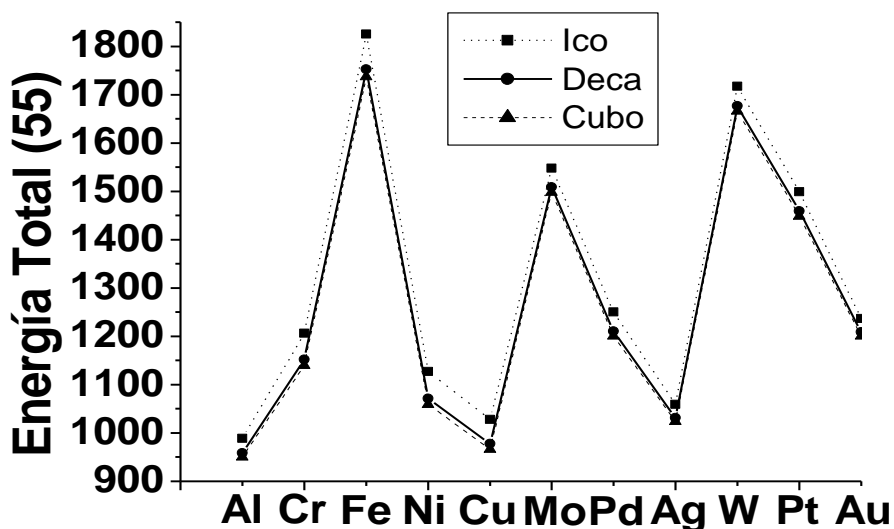
Elemento (X)	DECAEDRO ($Al_{42}X_{13}$)		
	Energía Total	Energía / Átomo	Ø Decaedro
Al	957.99	17.42	11.84
Cr	1151.85	20.94	11.61
Fe	1752.76	31.87	11.48
Ni	1071.35	19.48	11.58
Cu	977.95	17.78	11.66
Mo	1508.25	27.42	11.71
Pd	1210.43	22.01	11.71
Ag	1031.05	18.75	11.86
W	1676.40	30.48	11.71
Pt	1458.64	26.52	11.70
Au	1208.60	21.97	11.84

Tabla 1.7. Los datos de Energía Total, Energía/átomo están definidos en Kcal/mol; el diámetro de la nanopartícula (Ø) está en Å para el Decaedro Al_{55} .

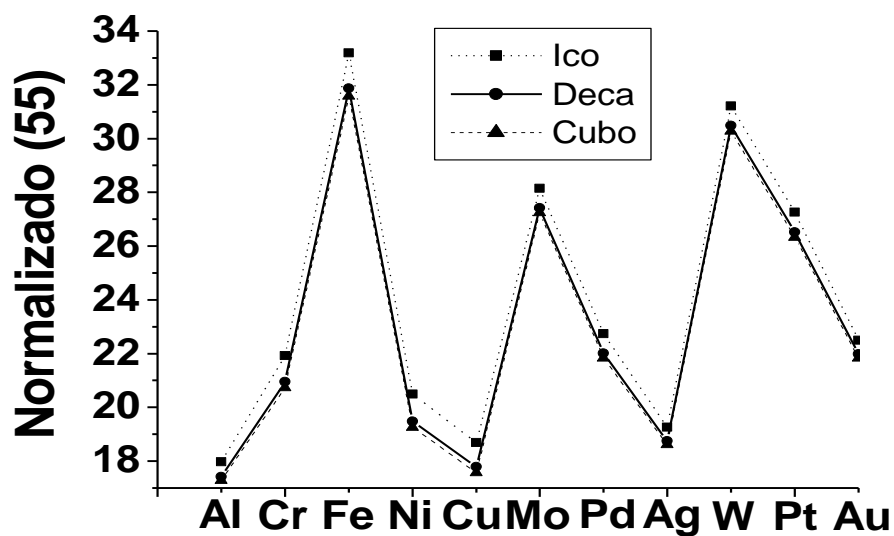
Elemento (X)	ICOSAEDRO (Al ₄₂ X ₁₃)		
	Energía Total	Energía / Átomo	Ø Icosaedro
Al	988.60	17.97	11.32
Cr	1206.13	21.93	11.03
Fe	1824.91	33.18	10.95
Ni	1127.22	20.49	11.02
Cu	1027.95	18.69	11.06
Mo	1547.93	28.14	11.25
Pd	1250.23	22.73	11.19
Ag	1059.25	19.26	11.37
W	1716.90	31.22	11.29
Pt	1499.13	27.26	11.23
Au	1236.85	22.49	11.39

Tabla 1.8. Los datos de Energía Total, Energía/átomo están definidos en Kcal/mol; el diámetro de la nanopartícula (Ø) está en Å para el Icosaedro Al₅₅.

Toda la información presentada refleja los resultados que se obtuvieron a lo largo de la investigación. En las gráficas 1.3 y 1.4 se expone el comportamiento de los metales de transición al manipular una agrupación atómica mayor, lo cual nos lleva a tener algunas deducciones. La primera es que la estabilidad continua siendo mucho mayor al estado inicial, reafirmando que la principal causa es el aumento de los niveles energéticos para cada elemento y la segunda que podemos notar fácilmente en los puntos graficados es que entre mayor sea el tamaño del cumulo de aluminio aleado menor será la diferencia de energía total utilizada entre las tres formas geométricas.



Gráfica 1.3. Energía Total definida en Kcal/mol para Al₅₅.



Gráfica 1.4. Energía/átomo definida en Kcal/mol para Al₅₅.

Para poder obtener estos valores de energía total en cada elemento nos apoyamos del software MS Modeling y además fue necesario utilizar algoritmos matemáticos.

Es claro que existe una gran semejanza entre las gráficas de Al₁₃ y Al₅₅, ya que la secuencia en los puntos graficados es similar tanto en formas geométricas como en los cúmulos de Aluminio. Cabe mencionar que los metales de transición Fierro (Fe) y Cobre (Cu) mantienen el mismo comportamiento en ambos casos, mayor y menor estabilidad respectivamente.

Capítulo V

Conclusiones

- Un sistema (cumulo) aleado posee mayor energía lo cual genera mejor estabilidad con respecto al cumulo original; es decir las aleaciones mejoran las condiciones de estabilidad con respecto al caso puro.
- Características que se consideran en los metales de transición como el diámetro de la nanopartícula y la energía / átomo de cada impureza (Metales de Transición) generan una mayor o menor estabilidad del sistema y/o proceso (aleación).
- Al utilizar modelos atómicos cada vez más grandes (Al_{13} y Al_{55}) la diferencia en valores de energía total se vuelve mínima, es decir que se está llegando a una convergencia energética hacia el bulto, para las tres formas geométricas consideradas en el presente trabajo: cubooctaedro, decaedro e icosaedro.
- Se encontraron dos tendencias marcadas en ambos modelos atómicos, la primera es que la forma geométrica icosaedro es la que presenta mejor estabilidad del sistema y la segunda es que a mayor estabilidad, menor será el diámetro de la nanopartícula.
- Por último es importante señalar que en cuanto al comportamiento de los metales de transición el Hierro (Fe) es el elemento que presenta la mayor estabilidad en todos los casos derivado de la afinidad en valencias que tiene con el Aluminio (Al), por otra parte el Cobre (Cu) se ratifica como el elemento de menor estabilidad en toda la investigación debido a la diferencia de electronegatividad entre ellos.

Bibliografía y Referencias:

- Lenntech BV. (1999 – 2015). Lenntech: tabla periódica. Países Bajos. Recuperado de <http://www.lenntech.es/periodica/tabla-periodica.htm>
 - Winter Mark. (1993 – 2015). Web elements: la tabla periódica. Reino Unido. Recuperado de <http://www.webelements.com/>
-
1. Mei Wang, Xiaowei Huang, Zuliang Du, Yuncai Li. *Chemical Physics Letters* 480 (2009) 258 – 264.
 2. Ehsan Shakerzadeh, Neda Barazesh, Sima Zargar Talebi. *Superlattices and Microstructures* Volume 76, December 2014, Pages 264 – 276.
 3. Yusuf Erdogan, Sakir Erkoc. *Computational Materials Science* Volume 79, November 2013, Pages 599 – 610.
 4. Ling Guo, Yanfei Yang. *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013) 3640 – 3649.
 5. Zhen - Yi Jiang, Wen - Jin Ma, Hai - Shun Wu, Zhi - Hao Jin. *Journal of Molecular Structure (Theochem)* 678 (2004) 123 – 127.
 6. Xiaoyu An, Ling Guo, Aixia Li. *J. Clust. Sci* (2015) 26; 505 – 527.