

Métodos Eficientes para la Optimización de Grupos de Partículas bajo el Potencial de Lennard-Jones

Carlos Barrón Romero

Departamento de Matemáticas Aplicadas y en Sistemas,
Universidad Autónoma Metropolitana-Cuajimalpa

Resumen

En Química Molecular, un problema de planteamiento simple y tradicional es la búsqueda de configuraciones óptimas bajo un buen potencial de interacción a pares, es decir la búsqueda de las posiciones en el espacio tridimensional de n partículas esféricas idénticas que tengan un potencial mínimo. En este simple caso se descartan otro tipo de interacciones con el fin de enfocarse a determinar estructuras geométricas óptimas que en principio corresponden a configuraciones de partículas estables por corresponder a un mínimo de potencial. A pesar de las simplificaciones, y de que el cálculo del Potencial no es complicado, no se han encontrado métodos eficientes para la búsqueda de estructuras óptimas de orden polinomial. Los métodos deben considerar que la complejidad de evaluar un buen potencial a pares es orden $O(n^2)$ para n partículas en posiciones dadas.

Un buen potencial a pares muy explorado y utilizado como referencia es el Potencial de Lennard-Jones. Con este potencial se han predicho estructuras geométricas de cúmulos de partículas existentes en la naturaleza. Los estudios de las estructuras geométricas de micro cúmulos de Hoare y MacInnes (1983) y los resultados de Northby (1987) han sido importantes en el entendimiento del problema y referencia obligada de los métodos de búsqueda de configuraciones óptimas bajo el potencial de Lennard-Jones de cúmulos de partículas. Ha habido propuestas de Métodos constructivos eficientes para reproducir a los candidatos óptimos conocidos pero con limitaciones en el número de partículas (de 2 hasta 100 o hasta 150 partículas). Se conoce que el problema es NP y parece que terminaron las expectativas de hallar métodos eficientes y configuraciones geométricas novedosas. En este trabajo se presentaran métodos eficientes basados en la estructura IF (bautizada por Northby como la unión de las lattices IC y FC). De este trabajo surge la conjetura de que todos los cúmulos óptimos bajo el potencial de Lennard-Jones pueden ser calculados a partir de un cúmulo extraído de IF, particularmente se mostrará que todos los cúmulos óptimos conocidos hasta la fecha provienen de IF. Respecto a la eficiencia de los métodos, se mostrará que existe una función que mide la complejidad de crecimiento o cambio entre los cúmulos de partículas consecutivos que no es acotada y que por tanto métodos de exploración exhaustivos son ineficaces, por otro lado, el uso de la simetría heredada de cortes de IF puede reducir dramáticamente la complejidad de evaluación de un buen potencial a pares.

Referencias

[The Cambridge Cluster Database \(CCD\)](#), Lennard-Jones Clusters desde 2 hasta 1000 partículas.

C. Barrón Romero, *Minimum search space and efficient methods for structural cluster optimization*. Comunicación Técnica No I-05-06/12-04-2005, <http://arxiv.org/abs/math-ph/0504030>, 4-8-2005.

H. Haberland, et al., *Melting of Sodium Clusters: Where Do the Magic Numbers Come from?*. Physical Review Letters, **94**, 035701, 2005.

M. R. Hoare and J. A. MacInnes. *Morphology and statistical statics of simple microclusters*. Advances in Physics, **32**(5):791-821, 1983.

J. A. Northby. *Structure and binding of Lennard-Jones clusters*: **13** £ n £ **147**. Journal of Chemical Physics, **87**(10):6166-6177, 1987.