



BÚSQUEDA DE NUEVOS CÚMULOS MOLECULARES Y SÓLIDOS CRISTALINOS DE SiO₂

Gerardo Hernández-Juárez¹, Fabiola Meza-May¹, Guadalupe Cardozo-Aguilar¹, José Luis Cabellos², Gabriel Merino² y Filiberto Ortiz-Chi³

¹Instituto Tecnológico Superior de Calkiní en el estado de Campeche; México

²Departamento de Física Aplicada, CINVESTAV-Mérida; México

³Cátedra CONACYT, División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, C.P. 86690, Cunduacán, Tabasco; México

e-mail: fortiz@itescam.edu.mx, gerardo0339@gmail.com

Partiendo solamente de una fórmula química, la búsqueda del mínimo global en cúmulos atómicos y moleculares puede realizarse usando métodos de la físicoquímica computacional. Asimismo, la implementación de nuevos métodos de optimización global y de eficientes algoritmos de búsqueda ha permitido importantes avances en la predicción de nuevos sólidos cristalinos estables bajo presión. En este trabajo se realiza una búsqueda exhaustiva de nuevos cúmulos estables de (SiO₂)_N N=2-10, así como una búsqueda predictiva de cristales moleculares de SiO₂, para establecer relaciones estructurales que expliquen la naturaleza de las soluciones encontradas y de las reportadas en la literatura. Para la búsqueda de cúmulos se utilizará el código Bilatu [1-2], mismo que incluye una serie de programas orientados a la búsqueda del mínimo global en cúmulos atómicos y moleculares donde la energía como función objetivo se evalúa a través de códigos como Gaussian o TeraChem. Para la predicción de estructuras cristalinas de se utiliza el código CALYPSO [3-4], mismo que incorpora un algoritmo inspirado en el comportamiento de enjambres en la naturaleza denominado Algoritmo de Optimización por Enjambre de Partículas (PSO). Este trabajo ha sido apoyado por el PRODEP (ITESCAM-PTC-026) a través del proyecto “Búsqueda de nuevas estructuras estables usando métodos a primeros principios”.

Referencias:

- [1] Vargas-Caamal, A.; Pan, S.; Ortiz-Chi, F.; Cabellos, J. L.; Boto, R. A.; Contreras-García, J.; Restrepo, A.; Chattaraj, P. M.; Merino, G. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016, **18**, 550.
- [2] Vargas-Caamal, A.; Cabellos, J. L.; Ortiz-Chi, F.; Rzepa, H. S.; Restrepo, A.; Merino, G. *Chem. Eur. J.* 2016, **22**, 2812.
- [3] Wang, Y.; Lv, J.; Zhu, L.; Lu, S.; Yin, K.; Li, Q.; Wang, H.; Zhang, L.; Ma, Y. *J. Phys.: Condens. Matter* 2015, **27**, 203203.
- [4] Wang, Y.; Lv, J.; Zhu, L.; Ma, Y.; *Comput. Phys. Commun.* 2012, **183**, 2063.