
**NUEVAS PEQUEÑAS NANOESTRUCTURAS DE MÍNIMO POTENCIAL DE
LENNARD JONES Y MORSE**

**NEW SMALL NANOSTRUCTURES OF MINIMUM POTENTIAL OF LENNARD
JONES AND MORSE**

Carlos Barrón Romero

Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Azcapotzalco

CDMX, México

ORCID * : 0000-0003-2435-6645

Fecha de envío: 05/05/2026

RESUMEN: El diseño molecular y el estudio de las nanoestructuras por Química Computacional, por ejemplo, bajo un mínimo potencial de tipo Van Der Waals, como lo son los potenciales de Morse y Lennard Jones es una forma de modelar y predecir nuevas estructuras de nano moléculas de partículas complementaria a las costosas investigaciones experimentales. Este trabajo presenta novedosas nanoestructuras estables a pequeños cambios de potencial, denominados nano vehículos que posiblemente se pueden crear experimentalmente. Se incluyen dos potenciales cuyo valle de minimización es muy angosto comparado con los valles de potenciales similares al de Lenard Jones 12-6. Los nano vehículos predichos son estables por ser de mínimo potencial y consisten en una envoltura de capas de partículas capaces de contener en su centro de masa a distintos, centrados y separados núcleos de pocas partículas. La estabilidad a variaciones de potencial se comprueba mediante una novedosa comparación entre potenciales de Morse similares al potencial de Lennard Jones. Los resultados muestran las novedosas formas geométricas que se obtienen entre distintas capas de envolturas y distintos tipos de núcleo.

PALABRAS-CLAVE: Química de materiales, Nanoquímica, Dinámica molecular.

ABSTRACT: Molecular design and the study of nanostructures by Computational Chemistry, for example, under a minimal Van Der Waals-type potential, such as the Morse and Lennard Jones potentials, is a way of modeling and predicting new structures of nano molecules of complementary particles. to costly experimental research. This work presents novel nanostructures stable to small potential changes, called nano vehicles that can possibly be created experimentally. Two potentials are included whose minimization valley is very narrow compared to the valleys of potentials similar to that of Lennard Jones 12-6. The predicted nano vehicles are stable because they are potential minimum and consist of an envelope of layers of particles capable of containing different, centered, and separated cores of few particles in their center of mass. Stability to potential variations is verified by a novel comparison between Morse potentials like the Lennard Jones potential. The results show novel geometric shapes that are obtained between different layers of shells and different types of cores.

KEYWORDS: Materials Chemistry, Nanochemistry, Molecular Dynamics.

Los resultados de los clústeres de LJ coinciden y en algunos casos superan a los publicados en *The Cambridge Cluster Database, Lennard-Jones clusters*, Wales et al. 2026. Una tabla actualizada de los posibles potenciales mínimos globales de LC, LJ, MC, MO y MR se tiene en la página:

https://academicos.azc.uam.mx/cbr/OptClusters/comMRLJMO_01.htm. Además, todos los posibles clústeres mínimos globales publicados en la página anterior satisfacen la condición de los estimadores de frontera, ver Barron 2023.

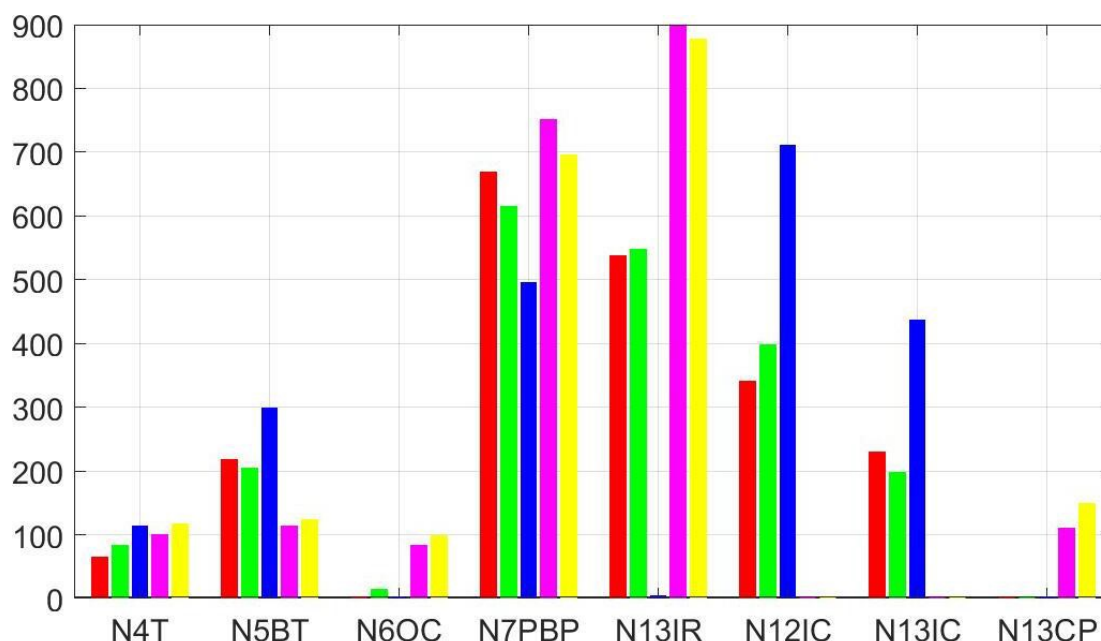


Figura 10. Histograma de la distribución de los posibles clústeres globales por tipo de núcleo de 4 a 2063 partículas.

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

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

La tabla 1 muestra las poblaciones de clústeres de los potenciales LC, LJ, MC, MO y MR de 4 a 2063 partículas. Como se aprecia en la figura 10, de especial atención se tienen los 83 y 98 clústeres de MC y LC de núcleo N6OC que superan los 14 de los clústeres de LJ. Otro caso es el de núcleo N13CP que no tiene posibles clústeres de mínimo global para LJ, MO y MR pero si para LC y MC. El histograma de la figura 10 muestra que la curvatura angosta de la gráfica de LC y MC favorecen clústeres con núcleo N6OC, M7PBP, N13IR y N13CP.

Ejemplos de clústeres de LC y MC para los núcleos N6OC y N13CP se muestran en la figura 11 y 12. La figura 13 muestra el verdadero clúster de 13 partículas gLJ13_N13IC para LJ (Ver Barron 2022^a) y los posibles clústeres mínimos globales de MC, MO y MR comparten el núcleo N13IC. Destaca que el posible optimó global de LC tenga núcleo N13IR.

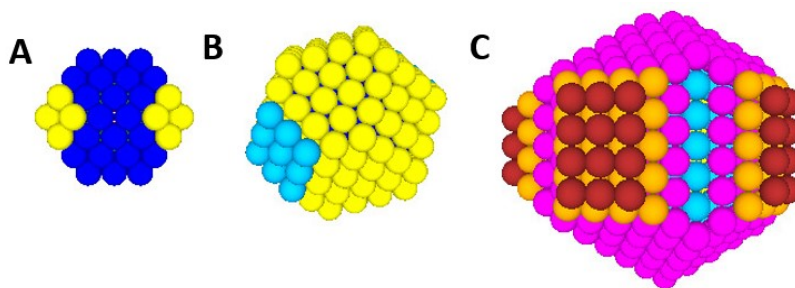


Figura 11. Clústeres de LC y MC de núcleo N6OC. **A.** LC(oLC124_N6OC) = -558:0177 y MC(oMC124_N6OC) = -557:4216. **B.** LC(oLC287_N6OC) = -1397:4047 y MC(oMC287_N6OC) = -1395:7960. **C.** LC(oLC760_N6OC) = -3932:9474 y MC(oMC760_N6OC) = -3932:1448.

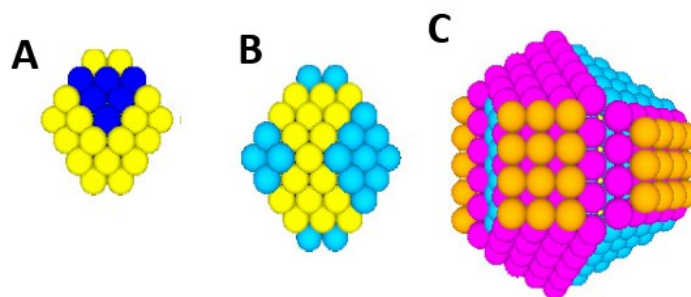


Figura 12. Clústeres de LC y MC de núcleo N13CP. **A.** LC(oLC86_N13CP) = -370:2641 y MC(oMC86_N13CP) = -369:8908. **B.** LC(oLC162_N13CP) = -749.7364 y MC(oMC162_N13CP) = -748:9229. **C.** LC(oLC546_N13CP) = -2773:8974 y MC(oMC546_N13CP) = -2773:4229.

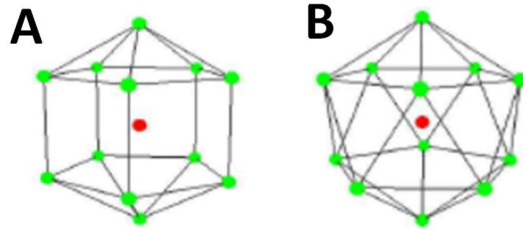


Figura 13. Clústeres de 13 partículas. **A.** LC(oLC13_N13IR) = -36:7369. **B.** LJ(gLJ13_N13IC) = -44:3268, MC(oMC13_N13IC) = -37:2589, MO(oMO13_N13IC) = -43:3177 y MR(oMR13_N13IC) = -42:4399. Los de LJ, MC, MO y MR tienen núcleo N13IC pero el de LC tiene núcleo N13IR.