

RECIBO EN
COMPLETO AL 24 DE
1984



Universidad Nacional Autónoma de México

Configuraciones de Mínima Energía de
Partículas Interactuantes en una Red



FACULTAD DE CIENCIAS
DIRECCIÓN GENERAL

T E S I S
Que para Obtener el Título de
F I S I C O
P r e s e n t a
JUAN JESUS GUTIERREZ GARCIA

TEJES CON
FALLA DE ORIGEN

México, D. F.

Abril de 1984



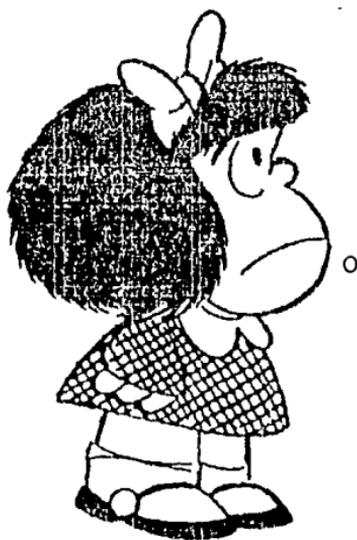
UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

A ti PADRE
a mi mamá y a la
memoria de mi papá



/ZA'S!....
/LA NOTA
SENTIMENTAL! /

Agradecimientos

*Buono es dar gracias a Yahveh,
y salmodiar a tu nombre, Altísimo,
publicar tu amor por la mañana,
y tu lealtad por las noches,
al son del arpa de diez cuerdas y la lira,
con un susurro de cítara.*

Sal 92, 2-4

No hay trabajo que haya sido realizado por una sola persona, y este no es la excepción. Se que no me será posible mencionar a todas las personas que colaboraron en ella pero al menos a quienes debo su gran apoyo para terminar este trabajo.

Sin duda Humberto Arce es un gran amigo y me ha indicado qué y cómo hacer cada una de las partes del trabajo, al igual que el Dr. Humberto Cárdenas, que con su valiosa colaboración y ayuda me permitió desarrollar este trabajo.

No puedo olvidar tampoco a los amigos como Amparo, Norma, Mónica, Arturo, Carlos y José, que siempre estuvieron dispuestos a responder mis dudas respecto al cómputo y a Hortensia que tuvo paciencia en aquellas largas jornadas de trabajo.

Y a los matemáticos Carmen, Paz, León, Mary y Francisco que alguna vez tuvieron paciencia para explicarme

como resolver algunos de los problemas con los que me topé en el desarrollo de esta tesis.

Además fuera del ámbito académico existen aquellas personas en las que todo hombre ha encontrado apoyo: Mi MAMÁ, mis hermanos, Norma, mi Tía Teresita, el padre Jesús Martínez, de quienes sólo guardo recuerdos gratos y en quienes siempre me he podido apoyar.

A todos ustedes *Gracias.*

Juan Jesús Gutiérrez García.

Contenido

Contenido.....	i
Capítulo I Antecedentes.....	1
I. 1. Introducción.....	1
I. 2. Catálisis y Adsorción.....	3
I. 3. Cristales y Redes.....	5
I. 4. Trabajos previamente desarrollados.....	8
I. 4. A. Solución en una dimensión.....	8
I. 4. B. Conjetura de Cocho.....	11
I. 4. C. Búsqueda Exhaustiva.....	12
Capítulo II Búsqueda Exhaustiva Mejorada.....	14
II. 1. Introducción.....	14
II. 2. Definiciones previas.....	15
II. 3. Algoritmo que genera las posibles mallas.....	20

II. 4. Cálculo de todas las posibles combinaciones.	27
II. 5. Cálculo de la energía y eliminación de mallas iguales.	30
Capítulo III Resultados.....	32
III. 1. Introducción.....	32
III. 2. Mallas Cuadradas.....	34
III. 2. A. Coberturas de 1/2 a 1/9.....	34
III. 2. B. Configuraciones que coinciden con las reportadas por Shinjo & Sasada [13].	38
III. 2. C. Configuraciones que no coinciden con las reportadas por Shinjo & Sasada [13].	40
III. 3 Mallas Triangulares	55
III. 3. A. Configuraciones que coinciden con las reportadas por Shinjo & Sasada [13].	55
III. 3. B. Configuraciones que no coinciden con las triangulares reportadas por Shinjo & Sasada [13]	60
III. 4. Resultados para coberturas 2/q.....	68
Capítulo IV Discusión.....	73
IV. 1. Introducción.....	73
IV. 2. Tendencia general de los resultados.	74

IV. 3 La red cuadrada.....	76
IV. 4. La red triangular.....	78
IV. 5. La degeneración de $1/6$	83
IV. 6. La Conjetura de Cocho et al.	88
Capítulo V Conclusiones.....	93
Referencias.....	96

Capítulo I

Antecedentes

*El niño Dios te escrituró un
establo,... y los veneros de
petróleo el diablo*

López Velarde

I. 1. Introducción.

En este siglo el petróleo ha permitido el desarrollo y crecimiento de gran parte de la industria. Más esta sustancia tan preciada no es útil en el estado en que se obtiene, sino que es necesario someterla a ciertos procesos para ser usada posteriormente en el desarrollo de combustibles, fibras sintéticas, aceites, plásticos, productos químicos, etc. La mayor parte de estos procesos están relacionados con el uso de catalizadores [1].

La catálisis es un fenómeno asociado al aumento en la velocidad de una reacción química, ocurre muy ampliamente en la naturaleza, y es importante para los seres vivos, ya que la rapidez y especificidad de ciertas cadenas de reacciones bioquímicas dependen de ciertos catalizadores llamados enzimas.

También la sociedad industrial es altamente dependiente de los catalizadores, como se señaló en el párrafo anterior cerca del 90% de los productos petroleros involucran en su producción algún tipo de catálisis.

Un caso particular de este fenómeno es la catálisis heterogénea, la cual en general ocurre en la superficie de un metal que sirve como catalizador. Se ha llegado a descubrir que para ciertas reacciones la adición de pequeñas cantidades de elementos alcalinos puede aumentar aún más la velocidad la reacción.

Es por ello que se vuelve realmente importante estudiar los distintos fenómenos físicos y químicos que se dan cuando se adsorben sobre una superficie metálica alguna cantidad de un elemento alcalino. Entre los distintos aspectos interesantes se encuentran las fases y ordenamientos de los adsorbatos sobre la superficie, y recientemente Arce et al. [2] han desarrollado un método para obtener estos ordenamientos a temperatura cero. Es el objetivo de esta tesis proponer algunas generalizaciones y mejoras al algoritmo de este método así como aplicar el método mejorado a otros tipos de redes.

Primero se presenta una breve discusión acerca de la catálisis y la adsorción (sección 1.2), posteriormente se explica como se describe mediante las redes a la superficie de los cristales (sección 1.3) y finalmente se exponen algunos de los trabajos previos al desarrollado en esta tesis (sección 1.4).

I. 2 Catálisis y Adsorción.

Un catalizador es una sustancia que aumenta la velocidad de una reacción y que puede recuperarse al final en su estructura original. La función general de un catalizador consiste simplemente en suministrar un mecanismo adicional por medio del cual los reactivos pueden transformarse en productos. Este mecanismo adicional tienen una energía de activación menor que la energía de activación del mismo en ausencia del catalizador, de manera que la reacción catalizada es más rápida.

Los fenómenos catalíticos se pueden clasificar de acuerdo a las condiciones en que se llevan a cabo como :

a) catálisis homogénea: donde todas las sustancias activas, incluyendo al catalizador, están en el mismo estado con una velocidad de reacción similar en todos los puntos.

b) catálisis heterogénea: el catalizador no es soluble en el sistema y está en un estado diferente muy a menudo sólido.

c) catálisis enzimática: en donde el catalizador es una molécula orgánica, este tipo de catálisis es característica de los seres vivos.

En el caso de la catálisis heterogénea es necesaria una interacción química entre el catalizador y el sistema de reactivos-productos. Esta interacción sólo modificará la naturaleza química de la superficie del catalizador, lo que lleva al concepto de adsorción.

La adsorción es un fenómeno puramente superficial; todos los sólidos tienen la propiedad de fijar (adsorber) las moléculas que se encuentren a su alrededor, porque los átomos que pertenecen a la superficie del cristal (sólido) experimentan la acción de fuerzas no balanceadas, provocadas por los distintos átomos que los

rodean (hacia el cristal tienen el contacto con átomos iguales a él, y en el resto de las direcciones los átomos son distintos). Este es un efecto parecido a la tensión superficial en los líquidos, pero de mayor intensidad, porque en el sólido las fuerzas que unen a los átomos son mayores que en los líquidos [3].

Se dice que es adsorción química cuando el enlace entre el adsorbato y el sustrato es covalente o iónico y las energías involucradas son alrededor de 0.43 eV a 8.4 eV. En cambio cuando la interacción sea producida por interacciones de van der Waals entre los momentos dipolares del adsorbato y los inducidos en la superficie y con energías aproximadamente de 0.25 eV, se trata de adsorción física [4].

El fenómeno catalítico heterogéneo requiere de la adsorción química en la superficie del catalizador. Con la cantidad de sustancia adsorbida y los sitios del catalizador se define el concepto de cobertura (frecuentemente se representa por θ), dado por el cociente entre estas cantidades:

$$\text{cobertura} = \theta = \frac{\text{cantidad adsorbida}}{\text{cantidad que puede adsorber}} \quad (1.1)$$

Los adsorbatos adquieren una distribución sobre el sustrato que dependerá de esta cobertura (esto es para todo fenómeno de adsorción sobre un cristal) estas distribuciones pueden ser observadas por diferentes técnicas experimentales, una muy utilizada es la difracción de electrones de baja energía (LEED por sus siglas en inglés). El principio de LEED es el mismo que la difracción de rayos X, sólo que al ser electrones de baja energía interactúan generalmente sólo con la superficie del material observado, sin embargo se debe indicar que la interpretación de los datos de LEED es notablemente complicada.

I. 3 Cristales y Redes.

Los cristales tienen un orden de largo alcance, es decir la estructura que existe en una región pequeña, se repite y encuentra en todas las partes del cristal. De esta estructura se puede obtener una celda mínima con la cual se construye todo el cristal. Una clasificación de los cristales es de acuerdo con la forma de su celda mínima.

Las más comunes de estas celdas unitarias para cristales tridimensionales son: la hexagonal de empaquetamiento compacto (hec), cúbica de cara centrada (cfc) y cúbica de cuerpo centrado (ccc) [5]. Un ejemplo de éstas se muestra en la figura 1.1.

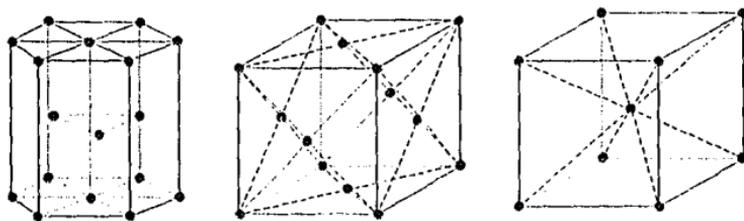


Figura 1.1 Localización de los centros atómicos en las estructuras hec, cfc, ccc.

Es de estas estructuras que surgen las distintas caras de los cristales dependiendo del plano en que sean cortados. Los distintos planos en que se puede ver un cristal son denotados por tres números que corresponden al inverso de las coordenadas donde el plano corta a cada uno de los ejes. Un ejemplo de estos cortes se muestra en la figura 1.2.

En la fig. 1.2 a) el plano no corta al eje "X", al eje "Y" lo corta en 1 y al "Z" en 1 entonces tendrá asociado el número (011) y la apariencia de las superficies

de los cristales cortados por estos planos se muestran junto cada una de las configuraciones.

En las caras del cristal es posible adsorber átomos; en particular se podrán adsorber en un sitio puente (alguna de las líneas entre dos puntos en la fig. 1. 2), en un sitio tope (sobre los puntos) o un sitio hoyo (el espacio entre los puntos que no está marcado con líneas). Estos serán entonces algunos de los sitios disponibles para adsorber una partícula y el conjunto de todos ellos, tomando en cuenta solamente los de un tipo (puente, tope u hoyo), se representan mediante una o varias redes de Bravais [3].

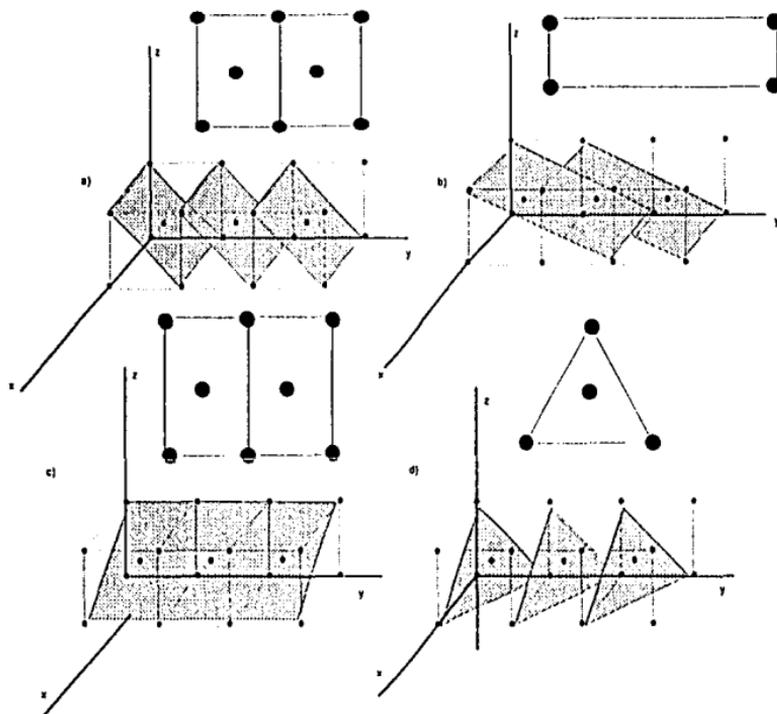


Figura 1. 2. Planos en una red ccc: a) planos (011) b) (0,1/2,1), c) (1,0,1) y d) (111).

Una red de Bravais está definida mediante dos magnitudes (en el caso bidimensional) y dos direcciones de los vectores que constituyen la celda mínima en la red, esta celda tiene la forma de un paralelogramo y al repetirse genera toda la malla¹.

En la fig. 1. 3 a) se muestra una red de Bravais y en la fig. 1. 3 b) la unión de dos redes de Bravais. En este trabajo, sólo se toman los vectores que generan a una de las dos redes y la otra se considera como una decoración. Esta situación también puede describirse como una red de Bravais con una base diatómica [6].



Figura 1. 3 Redes de Bravais a) una sola y b) dos redes superpuestas.

Estas mallas tienen asociadas simetrías que son: a) La operación identidad, que consiste de dejar todos los puntos de la red intactos. b) La operación inversión, que consiste en invertir todos los puntos de la red respecto del origen c) La rotación de 180° . Además en cada caso especial habrá otras simetrías que están asociadas a las rotaciones y reflexiones [7], y que se menciona con más detalle en el siguiente capítulo.

¹ Se usa de manera indistinta el termino de red y de malla a lo largo de este trabajo.

Las redes de Bravais también se clasifican de acuerdo a su celda mínima como se muestra en la figura I. 4. Todas ellas son un caso particular de la red oblicua, pero sus simetrías son diferentes.

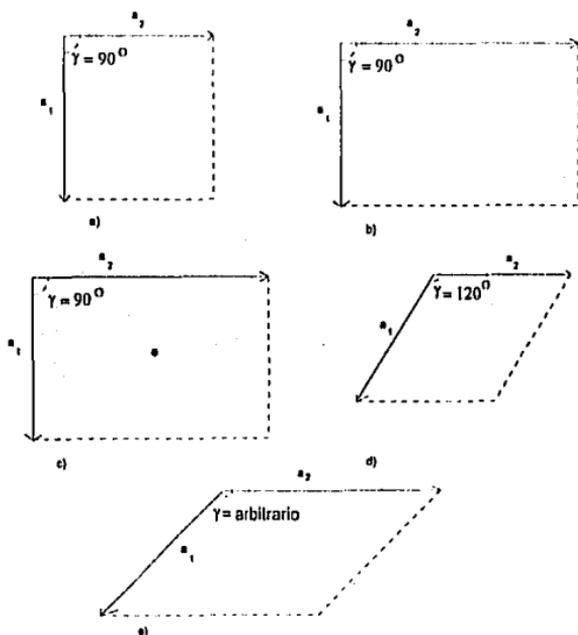


Figura I. 4 Redes de Bravais a) red cuadrada, b) red rectangular c) red rectangular centrada, d) hexagonal y e) oblicua.

I. 4. Trabajos previamente desarrollados.

I. 4. A. Solución en una dimensión.

El problema de encontrar las configuraciones de energía mínima para una malla cuadrada unidimensional ya ha sido resuelto y demostrado de forma rigurosa de manera simultánea por Pokrovsky y Ulim [8]. y por Humbard [9],

suponiendo que la interacción entre partículas es mediante un potencial repulsivo monótonamente decreciente, con segunda derivada mayor que cero en todos los puntos y que tiende a infinito más rápido que $\frac{1}{r}$.

El problema consiste en encontrar las distancias entre los adsorbatos para una cobertura de la forma p/q con p y q primos relativos. La regla es tomar la separación entre los vecinos como sigue (donde 0 es la cobertura):

$$\begin{aligned}
 &\text{Primeros vecinos } [1/0] < 1/0 < [1/0] + 1 \\
 &\text{Segundos vecinos } [2/0] < 2/0 < [2/0] + 1 \\
 &\text{Terceros vecinos } [3/0] < 3/0 < [3/0] + 1 \qquad (1.2.) \\
 &\qquad \qquad \qquad \downarrow \\
 &\text{Enésimos vecinos } k + [1/0] < n + 1/0 < [1/0] + k + 1
 \end{aligned}$$

Por ejemplo: Para la cobertura $7/10$ los primeros vecinos están a una distancia de:

$$\begin{aligned}
 &\text{Primeros vecinos : } [10/7] = 1; \text{ y } [10/7] + 1 = 2 \\
 &\text{Segundos vecinos : } [20/7] = 2; \text{ y } [20/7] + 1 = 3 \\
 &\text{Terceros vecinos : } [30/7] = 4; \text{ y } [30/7] + 1 = 5 \\
 &\text{Cuartos vecinos : } [40/7] = 5; \text{ y } [40/7] + 1 = 6 \qquad (1.3.) \\
 &\text{Quintos vecinos : } [50/7] = 7; \text{ y } [50/7] + 1 = 8 \\
 &\text{Sextos vecinos : } [60/7] = 8; \text{ y } [60/7] + 1 = 9 \\
 &\text{Séptimos vecinos : } [70/7] = 10; \text{ y } [70/7] + 1 = 11
 \end{aligned}$$

Después de estos comienza a repetirse la secuencia para el resto de los vecinos. Si se dibujan en una recta se obtendría la configuración que se muestra la figura 1. 5.

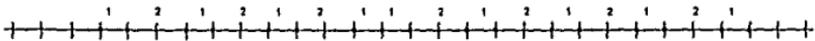


Figura 1. 5 Configuración de energía mínima en una red unidimensional con cobertura 7/10.

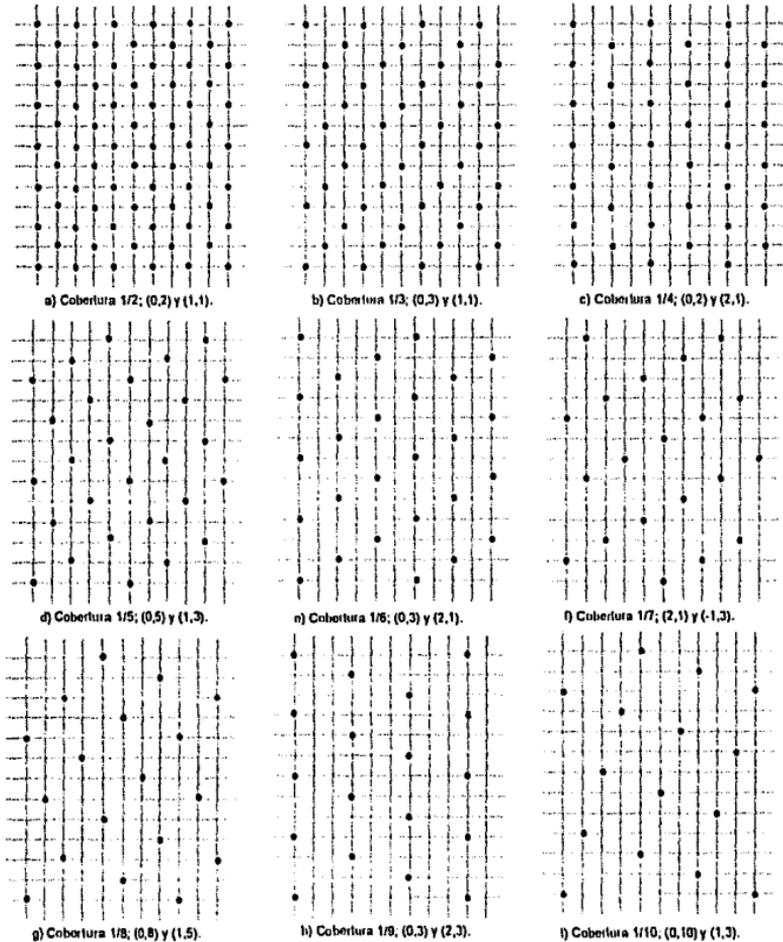


Figura 1. 6 Configuraciones propuestas por Cocho et al.

Como ejemplo si cobertura es $7/10$, está entre $1/1$ y $1/2$, ($1/2 < 7/10 < 1/1$). Se busca un lado en común y se forma tiras alternando las celdas de acuerdo con la forma en que se distribuyen los puntos en la solución unidimensional (fig. I. 5).

En la figura I. 7. se han marcado con 1 y 2 los rombos que corresponden a cada una de las coberturas, se puede ver que esta secuencia es la misma que la de la fig. I. 5.

I. 4. C. Búsqueda Exhaustiva.

La búsqueda exhaustiva es un método recientemente desarrollado para encontrar los ordenamientos de los adsorbatos a temperatura cero, y que se aplicó con buenos resultados a la redes cuadradas [2], caso para el cual se estudió la conjetura de Cocho, encontrando que es válida en lo general hasta cobertura $1/10$; y cotejándose exitosamente los resultados con experimentos para $K/1r(100)$ [11] y $Cs/Rh(100)$ [12]. Para esta comparación fue muy útil usar la idea de cuasidegeneración, la cual explica la ausencia de ciertos ordenamientos en los patrones experimentales.

Este método tiene como antecedente la propuesta de algunos investigadores [8] [13] de calcular la energía de configuraciones correspondientes al inverso de las coberturas bajo estudio, sin embargo al estar constreñida el área al inverso de estas coberturas se limitaban los casos a revisión. Arce et al. aumentaron el número de casos introduciendo un factor multiplicativo al numerador y al denominador de la cobertura. Para estudiar la cobertura p/q con "p" y "q" primos relativos se trabaja con h_p/h_q (h un natural), de tal manera que se buscan todas las mallas de área h_q , y se investigan todas las posiciones posibles de h_p-1 partículas al interior de las celdas de área h_q [14].

El algoritmo para implementar este método consistió en calcular la energía de un ordenamiento cualquiera y asignarlo (temporalmente) como el de mínima energía, luego calcular la energía de las siguientes configuraciones por pasos definidos por el incremento en el número de decoraciones sobre la celda de área h_q , en cada uno de los pasos se calcula la contribución a la energía y se compara con la energía mínima, si ésta es rebasada se suspende el cálculo de esa configuración y se elimina un bloque de casos, de no ocurrir así se substituirá la nueva configuración y la energía correspondiente como la de menor energía [14].

Este algoritmo tiene como desventaja que debe realizarse para cada tipo de potencial bajo estudio, lo que obliga a repetir los cálculos tantas veces como situaciones físicas se desee estudiar, por otra parte no se tiene una buena idea del "espectro" de energías asociadas a cada cobertura y área. Estas dificultades son las que se superaron con la "búsqueda exhaustiva mejorada" que se desarrolló en esta tesis.

La otra contribución importante introducida en [2] para el estudio de la adsorción, fue un nuevo esquema de aproximación de los potenciales dipolares infinitos, este esquema permite encontrar los resultados "convergentes" con mayor rapidez pues es continuo y cóncavo a diferencia de esquemas anteriores que son discontinuos [12] [14]. Bajo este esquema de aproximación se realizan los cálculos de la energía presentados en este trabajo.

Capítulo II

Búsqueda Exhaustiva Mejorada

Mi designio, pues, no es enseñar aquí el método que cada cual debe de seguir para dirigir su razón, sino ver de qué manera he procurado dirigir la mía.

Descartes

II. 1 Introducción.

En este capítulo se describe el método empleado para encontrar las configuraciones de mínima energía de partículas que interactúan entre sí con un potencial repulsivo, y que se encuentran en los nodos de una red. Primero se definen algunos de los conceptos que se emplean en el capítulo, por ejemplo: malla, cobertura, decoración, etc.

La descripción del algoritmo se hace a través de las siguientes partes:

- generación de todas las posibles mallas y decoraciones,
- búsqueda de combinaciones posibles para una cobertura determinada,
- cálculo del potencial de interacción entre las partículas que constituyen las mallas y
- eliminación de arreglos iguales.

La finalidad de esta división es hacer que el algoritmo sea lo más estructurado posible para que su implementación sea sencilla [15].

Los resultados obtenidos por el algoritmo que genera todas las posibles mallas y sus decoraciones, se podrán emplear tanto para redes cuadradas como triangulares, y de cualquier ángulo en general.

El método de la búsqueda exhaustiva mejorada necesita de ciertos resultados matemáticos que se demuestran en este capítulo.

II. 2 Definiciones previas.

Dentro de esta tesis se utiliza el concepto de malla como el conjunto de posiciones (parejas ordenadas) que son combinación lineal entera de dos vectores $V_1=(x_1,y_1)$ y $V_2=(x_2,y_2)$ llamados generadores de la malla. Donde x_1, y_1, x_2, y_2 pertenecen al anillo de los enteros.

Se puede ver que con esta definición las mallas serán un grupo, y que desde cada punto de la malla la descripción es totalmente equivalente.

A las mallas se les puede clasificar por medio del sistema de referencia al que pertenecen sus vectores generadores, pues las mismas parejas de coordenadas pueden generar mallas distintas dependiendo del sistema de referencia en que se encuentren (ver fig. II. 1). En un sistema ortogonal habrá mallas "cuadradas" como las de la (fig. II. 1 a); si el ángulo entre los

ejes es de 60 grados entonces se tratará de mallas "triangulares" como las de la (fig. II. b) y en general se podrá describir por medio de este ángulo a la clase de mallas que se estudiarán en esta tesis.

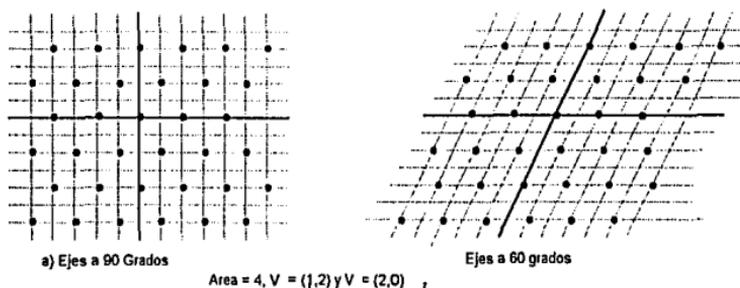


Figura II. 1 La misma configuración descrita en distintos sistemas de referencia genera mallas distintas.

Además cada malla tiene asociado un número entero, que se denota con Λ , que es el área del paralelogramo formado por los vectores generadores.

Para calcular esta área se puede utilizar el producto cruz. Sean los vectores que generan la malla V_1 y V_2 entonces:

$$V_1 = x_1 \hat{v}_1 + y_1 \hat{v}_2 \quad \text{y} \quad V_2 = x_2 \hat{v}_1 + y_2 \hat{v}_2 \quad (\text{II. 1.})$$

correspondiendo \hat{v}_1, \hat{v}_2 a los vectores generadores de la red (que describe el sustrato), los cuales son unitarios. El área correspondiente a la celda V_1 y V_2 se puede calcular como:

$$A = |V_1 \times V_2| \quad (II. 2.)$$

que después de un desarrollo muy simple se muestra que es:

$$A = |(x_1 y_2 - x_2 y_1)(\hat{v} \times \hat{w})| = |x_1 y_2 - x_2 y_1| a \text{ con } a = |\hat{v} \times \hat{w}| \quad (II. 3.)$$

De lo anterior se infiere que el número de sitios es igual al primer factor, que también puede verse como el número de celdas unitarias de área $a = |(\hat{v} \times \hat{w})|$ que "cabren" en $|V_1 \times V_2|$. Donde \hat{v} y \hat{w} serán distintos dependiendo de la red que se estudie (cuadrada, triangular,...).

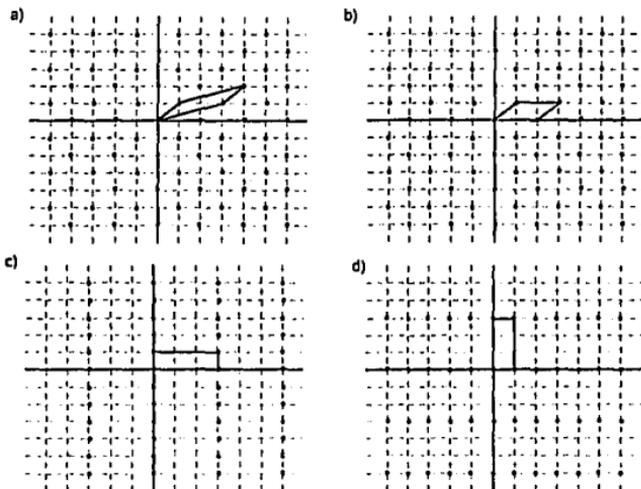


Figura II.3 Las mallas a) y b) son iguales pero tienen distintas representaciones y c) y d) son iguales después de una rotación de 90 grados a una de ellas.

De la definición de malla se tiene que dos mallas serán iguales cuando cada uno de los puntos de una malla esté en la otra e inversamente (que es

la igualdad entre conjuntos), pero además, se considerara a dos mallas iguales si es posible obtener una de la otra a través de rotaciones o reflexiones, como se muestra en la figura II. 3. c y d.

También se usa el concepto de cobertura, asociado al número de partículas por sitios disponibles (usualmente se indica con la letra θ). Así, la malla generada por los vectores $(1,2)$ y $(3,4)$ tiene un área de 2 (esto es, dos sitios disponibles) y una cobertura de $\frac{1}{2}$, si dentro del paralelogramo con coordenadas $(0,0)$, $(1,2)$, $(3,4)$ y $(4,6)$ sólo hay una partícula (que está en el origen) fig. II. 4 a.

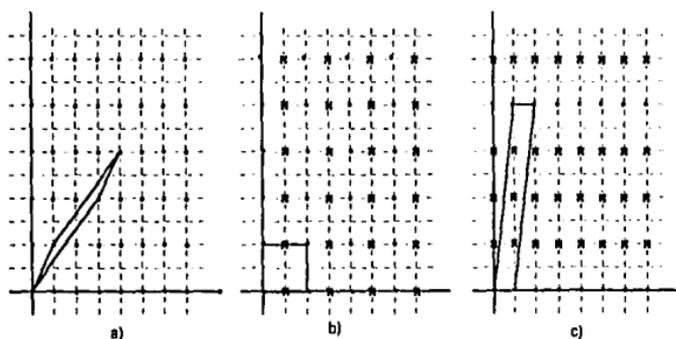


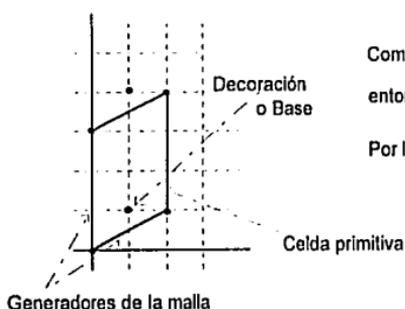
Figura II. 4 a) Malla de cobertura $\frac{1}{2}$ descrita por un paralelogramo de área dos sin decoración b) de área 4 con una decoración y c) de área 8 con tres decoraciones.

Pero una con área 4 u 8 puede seguir teniendo cobertura $\frac{1}{2}$ si dentro del paralelogramo hay 2 o 4 partículas respectivamente, tomado en cuenta que una de ellas siempre está en el origen; a las restantes se les llamarán

decoraciones o basas y sólo pueden tener coordenadas enteras (fig. II. 4), (porque se considera adsorción en un solo tipo de sitios de la red).

Como las posiciones de las partículas dentro del paralelogramo no son combinación lineal de los vectores de la malla, éstas serán generadas por vectores V_d . Y una configuración podrá tener hasta $A-1$ vectores V_d (A es el área asociada a la malla).

Sean los vectores con coordenadas $(0,3)$ y $(2,1)$ y la decoración o base $(1,1)$.



Como hay sólo una decoración, $n = 1$

$$\text{entonces la cobertura} = \frac{(1+1)}{(0 \cdot 1 + 3 \cdot 2)}$$

Por lo tanto

$$0 = \frac{1}{3}$$

Figura II. 5 Elementos para caracterizar una malla.

Entonces una configuración esta caracterizada por: Un número A entero que es el área, cuatro coordenadas para los dos vectores que la generan y dos- n números enteros como coordenadas de los vectores que representan a las decoraciones, con $n < A$. Y su cobertura será $(n+1)/A$, que se expresa como p/q donde p y q son primos relativos. Un ejemplo se muestran en la fig. II. 5

II. 3 Algoritmo que genera las posibles mallas.

Para generar todas las mallas posibles se hace de acuerdo con su área asociada, esto es: para el área uno se buscan todos los números enteros que satisfagan la siguiente relación (deducida en la sección anterior):

$$I = |x_1 y_2 - x_2 y_1| \quad (\text{II. 4.})$$

Del mismo modo para área dos, tres, cuatro, ... hasta un número que se determina de acuerdo a las configuraciones que se desee estudiar. Dentro de este trabajo se estudia hasta área 40.

Entonces el problema consiste en encontrar todas las parejas de coordenadas que cumplan con la relación (III. 3). Es fácil ver que este conjunto es infinito, pero como sólo interesan las que son distintas, se puede restringir los valores de las coordenadas como sigue:

$$\begin{aligned} x_1 &= 0 \\ 0 &\leq y_1 \leq A \\ 0 &\leq x_2 \leq A \\ 0 &\leq y_2 \leq A \end{aligned} \quad (\text{II.5})$$

Esto es posible, porque para cada malla de área A se pueden dar distintas representaciones, como en el caso de las figuras II. 3 a y II. 3 b ó II. 4a, 4b y 4c, y cualquier malla de área A tiene una representación que cumple con las condiciones (3), un ejemplo se muestra en la figura II. 6.

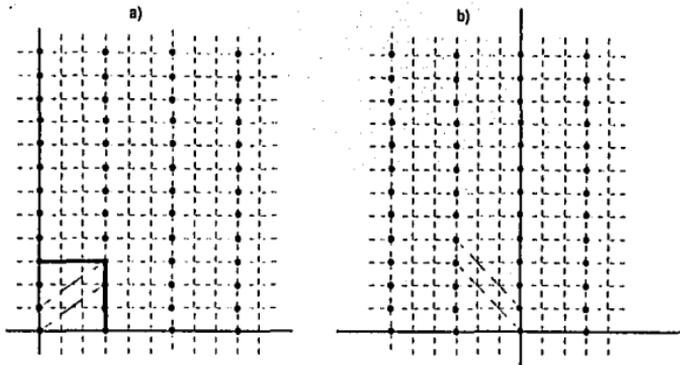


Figura II. 6 Toda malla "b)" tiene una representación "a)" que cumple con las condiciones (II. 5).

Para poder demostrarlo se necesitan ciertas definiciones y algunas propiedades que se enuncian a continuación.

- Para una malla M se construye un conjunto P formado por todas las primeras coordenadas de los elementos de M . Esto es si (x,y) pertenece a M entonces x pertenece a P . Y lo denotamos como:

$$P_M = \{x \in Z \mid \exists y \in Z \ (x,y) \in M\} \quad (II. 6.)$$

- Para una malla M se construye un conjunto Q formado por todos los enteros y tales que $(0,y)$ pertenece a la malla M . Este conjunto no es vacío porque la pareja $(0,A)$ está en el (A área asociada a la malla).

$$Q_M = \{y \in Z \mid (0,y) \in M\} \quad (II. 7.)$$

- Para los conjuntos P y Q se toman a X_n y Y_n , como:

$$X_n = \text{Min}_{x \in P} \{x\} \quad \text{y} \quad Y_n = \text{Min}_{y \in Q} \{y\} \quad (II. 8.)$$

es decir, los mínimos elementos en valor absoluto y distintos de cero de cada conjunto.

De estas definiciones se deduce que todo elemento x del conjunto \mathbf{P} se puede expresar como $x = KX_0$, donde K es entero.

Demostración (Por reducción al absurdo): Supongamos que existe x en \mathbf{P} que no cumple con ser de la forma KX_0 , entonces $x = KX_0 + r$, por el teorema del residuo para enteros, donde $r > 0$ y $r < X_0$. Pero como \mathbf{P} es cerrado frente a la multiplicación y a la suma (propiedad que hereda directamente de \mathbf{M}) $r = x - KX_0$ pertenece a \mathbf{P} , y es menor a X_0 que es una contradicción. De la misma forma para el conjunto \mathbf{Q} con Y_0 .

De estas propiedades podemos ver que toda malla generada por $V_1=(x_1, y_1)$ y $V_2=(x_2, y_2)$ puede ser generada por otros de la forma:

$$V_1' = (0, y_1') \text{ y } V_2' = (x_2', y_2') \quad (\text{II. 9.})$$

Para demostrarlo se toma una malla \mathbf{M} generada por $V_1=(x_1, y_1)$ y $V_2=(x_2, y_2)$ y (x, y) cualquier elemento de \mathbf{M} , hay que demostrar que está generado por una base $V_1' = (0, y_1')$ y $V_2' = (x_2', y_2')$. Si a la pareja (x, y) se le resta el vector $k(X_0, b)$ donde b es tal que (X_0, b) pertenecen a \mathbf{M} y k es la constante que cumple con $x = kX_0$ tenemos:

$$(x, y) - k(X_0, b) = (0, a) \quad (\text{II. 10.})$$

donde $a = y - kb$. Como la pareja $(0, a)$ pertenece \mathbf{M} (por ser combinación lineal de dos elementos de \mathbf{M}) existe L tal que $a = Lj_0$ y por tanto:

$$(x, y) = k(x_0, b) + L(0, j_0) \quad (\text{II. 11.})$$

esto implica que toda la malla se puede generar a partir de los vectores $(0, j_0)$ y (x_0, b) Q. E. D.

Con estos resultados es posible mostrar que cualquier malla \mathbf{M} generada por vectores $V_1=(x_1, y_1)$ y $V_2=(x_2, y_2)$ tales que alguna de sus coordenadas x_1, y_1, x_2 o y_2 es mayor al área asociada a \mathbf{M} se puede generar con dos vectores $V'_1=(x'_1, y'_1)$ y $V'_2=(x'_2, y'_2)$ tales que sus cuatro coordenadas sean menores que el área asociada.

Para demostrarlo se usa que siempre es posible encontrar unos vectores que generan la malla \mathbf{M} , de la forma:

$$V'_1=(0, y'_1) \text{ y } V'_2=(x_2, y'_2) \quad (\text{II. 12.})$$

Donde el área asociada es $\Lambda = |x_2 \cdot y_1|$ por lo tanto $x_2, y_1 < \Lambda$ y siempre es posible tomar $y'_2 = ky_1 + a$ con $a < y_1$ así:

$$-k(0, y'_1) + (x_2, y'_2) = (x_2, a) \quad (\text{II. 13.})$$

donde (x_2, a) es un vector que también pertenece a la malla, y como el área asociada a $(0, y'_1)$, (x_2, a) es la misma, estos vectores generan a \mathbf{M} y todas sus coordenadas son menores que el área. Q. E. D.

Las posibles combinaciones de las coordenadas que cumplan con (II. 5.) son $(\Lambda+1)^2$ de las que se necesita revisar si cumplen la relación (II. 3.) y entre estos escoger aquellas que sean distintas entre sí.

Por ejemplo la pareja de vectores $(1,2)$, $(0,2)$ y la pareja $(2,1)$, $(0,1)$ tienen área asociada de 2 y cumplen con el conjunto de restricciones (II. 5.), sin embargo forman la misma malla, pero reflejadas con respecto a la Identidad. (ver fig. II. 7).

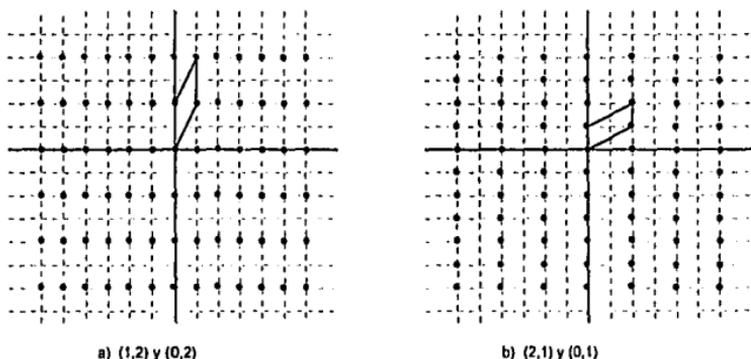


Figura II-7 Mallas iguales pero reflejadas sobre la identidad.

Para comparar dos mallas sin decoraciones se utiliza que, si M y M' son dos mallas generadas por $V_1=(x_1, y_1)$, $V_2=(x_2, y_2)$ y $V'_1=(x'_1, y'_1)$, $V'_2=(x'_2, y'_2)$ respectivamente, y el área asociada a M es igual a la asociada a M' , entonces M es igual a M' si y sólo si existen constantes enteras a , b , c y d tales que

$$\begin{aligned} V_1' &= aV_1 + bV_2 \\ V_2' &= cV_1 + dV_2 \end{aligned} \quad (\text{II. 14.})$$

Como es una doble implicación la demostración se divide en dos casos, en el primero la hipótesis es que M y M' son iguales y por demostrar que existen enteros a, b, c y d tales que

$$\begin{aligned} V_1' &= aV_1 + bV_2 \\ V_2' &= cV_1 + dV_2 \end{aligned} \quad (\text{II. 15})$$

Por definición de M' , V_1' y V_2' pertenecen a M' (con constantes 1,0 para V_1' y 0,1 para V_2'), y como por hipótesis $M=M'$ entonces V_1' pertenece a M por lo tanto existen a, b enteras tales que $V_1' = aV_1 + bV_2$, e igual para V_2' .

En el segundo caso la hipótesis es que existen a, b, c, d enteros, tales que $V_1' = aV_1 + bV_2$ y $V_2' = cV_1 + dV_2$ y se demostrara que $M=M'$.

Sea (x, y) en M' por demostrar que (x, y) pertenece a M .

Como (x, y) pertenece a M' entonces $(x, y) = K'V_1' + L'V_2'$ con K' y L' enteros, pero por hipótesis: $(x, y) = K'(aV_1 + bV_2) + L'(cV_1 + dV_2) = (K'a + L'c)V_1 + (K'b + L'd)V_2$ por lo tanto (x, y) pertenece a M .

Ahora: Sea (x, y) en M por demostrar que (x, y) pertenece a M' .

Como (x, y) pertenece a M entonces $(x, y) = KV_1 + LV_2$ con K y L enteros, Utilizando que las áreas de M y M' son iguales se puede mostrar que:

$$|ad - bc| = 1 \quad (\text{II. 16.})$$

por lo tanto es posible expresar a partir de la hipótesis y de este hecho a V_1 y V_2 en terminos de V'_1 y V'_2 como sigue:

$$V_2 = -cV'_1 + aV'_2 \text{ y } V_1 = dV'_1 - bV'_2 \quad (\text{II. 17})$$

por lo tanto $(x,y) = (-K_2c + k_1d) V'_1 + (aK_2 - K_1b) V'_2$ entonces (x,y) pertenece a M' . y entonces $M=M'$ Q. E. D.

Además se considera que las mallas M y M' son iguales, si para una transformación σ tenemos que $\sigma(M) = M'$. donde σ preserva la distancia, por esto tiene que ser: una rotación, reflexión, translación, o reflexión y deslizamiento [7].

De todas estas transformaciones, sólo se consideran las que son simetrías del sistema de referencia que se use. Estas se listan en la tabla II. 1.

TABLA II. 1. Simetrías en las mallas de acuerdo al ángulo que forman los ejes de referencia.

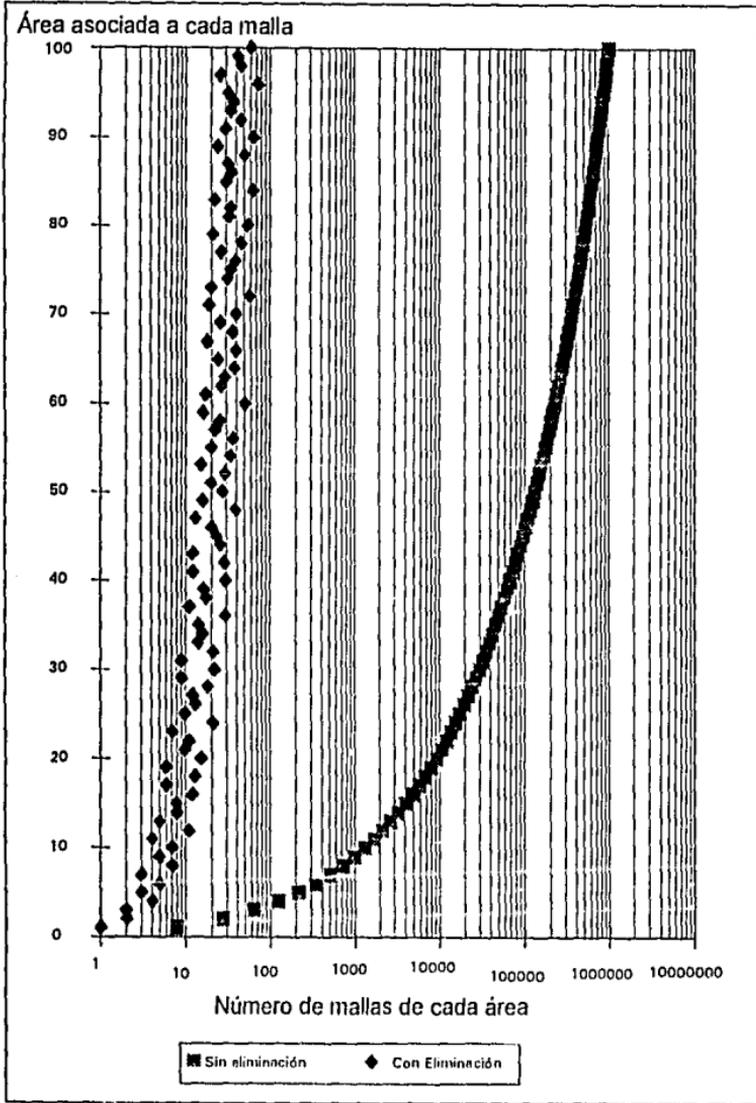
Ángulo entre los ejes	Reflexiones (ángulos de inclinación de las rectas)	Rotaciones
60°	30,60,90,120,150,180	0,60,120,180,240,300
90°	45,90,135,180,	0,90,180,270
otro(0)	0/2,(0+90)/2	0,180

Los vectores que cumplen con las condiciones (II. 3.), (II. 5.) y son distintos entre sí forman una lista de todas las posibles mallas con área A que se utilizará en los siguientes apartados.

Para ver el efecto que causa la reducción de casos se gráfica, el número total de mallas, antes y después de la eliminación, contra el área de cada malla, y se muestra en la gráfica II. 1. La gran reducción de configuraciones hace que el método sea más eficiente, porque para área 20, por ejemplo, no es necesario estudiar las 9,261 configuraciones posibles sino sólo 15 diferentes.

II. 4 Cálculo de todas las posibles combinaciones.

Cuando se estudia una cobertura, por ejemplo $1/2$, es posible hacerlo con una malla de área 4 y una decoración, que puede ocupar tres sitios diferentes dentro del paralelogramo que forman los vectores generadores, o hacerlo en área 6 con dos decoraciones, y hacer todas las posibles combinaciones para colocar dos decoraciones en 5 lugares, y, si se hace con área 8 se toman las combinaciones de 3 en 7 [16].



Gráfica II. 1. Efecto causado por la reducción de casos.

Tabla II. 2 Posibles combinaciones de mallas para cobertura $1/2$.

Para la cobertura $\frac{1}{2}$ se tiene que:			
Área	Decoraciones	Número de posibles lugares	Número de combinaciones
4	1	3	3
6	2	5	10
8	3	7	35
10	4	9	126

En general para estudiar la cobertura p/q con área Λ se pueden tomar las combinaciones de $(p-1)$ en $\Lambda-1$. Donde Λ debe de ser múltiplo entero de q . Se resta la unidad a p porque una partícula siempre está fija en el origen.

De todas estas posibles combinaciones algunas de ellas podrán ser iguales, ya sea directamente o bajo una transformación, como por ejemplo:

La malla generada por $(0,3)$ y el $(2,0)$ con la decoración $(1,1)$, será igual a la generada con los vectores $(0,3)$ y $(2,0)$ con la decoración $(1,2)$, bajo una reflexión en el eje x y ambas son iguales a la generada con $(0,6)$ $(2,0)$ con decoraciones $(1,1)$ $(1,4)$ y $(2,3)$, aunque las áreas sean distintas. (ver fig. II. 8).

Para cada una de las mallas generadas por el procedimiento planteado en la unidad anterior y una cobertura p/q se toman todas las posibles combinaciones de mallas con área q y $p-1$ decoraciones, además las de área $2q$ con $2p-1$ decoraciones y en general las de nq con $np-1$ decoraciones.

Donde el valor de n se determina de acuerdo con el tamaño del área en que se desee estudiar la cobertura.

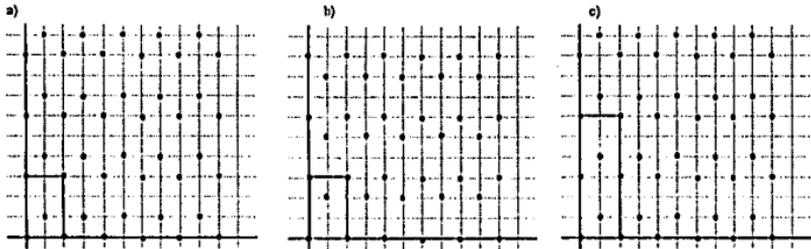


Figura II. 8 Las configuraciones a) y b) son iguales si una de ellas se le aplica una rotación de 90 grados y las configuraciones a) y c) son iguales aún cuando tienen áreas distintas.

II. 5 Cálculo de la energía y eliminación de mallas iguales.

Con la finalidad de hacer más rápida la eliminación de configuraciones iguales se calcula la energía y sólo se comparan aquellas que posean energías iguales. La comparación es necesaria porque dos mallas de energía diferente son diferentes, pero dos mallas con la misma energía no son necesariamente iguales.

Para el cálculo de la energía se usa un potencial de la forma:

$$V(x,y) = \frac{1}{|r(x,y)|^2} - \frac{1}{\text{alcance}^3}$$

El alcance es el parámetro para hacer el corte, porque no es posible tomar la interacción hasta infinito, esto es, para partículas a una distancia mayor al alcance su contribución a la energía es cero.

El segundo término es necesario para suavizar el corte y así evitar las configuraciones anómalas [2].

La comparación entre las mallas con la misma energía, se hace directamente por medio de la definición de igualdad de conjuntos, verificando que los puntos de una malla que están a cierta distancia del origen esten en la otra malla.

Las configuraciones con las mismas energías y distintas entre sí se les llama configuraciones degeneradas.

El resultado final del método será una lista con todas las configuraciones, posibles y distintas entre sí, para un área y una cobertura. Esta lista se usa directamente para el cálculo de distintas interacciones.

Capítulo III

Resultados

¿Hechos? - replicó él -. Tome un poco más de ron, señor Franklin, y superará usted la debilidad de creer en los hechos! ¡Juego sucio, señor!

Wikkie Collins, Monstone

III. 1. Introducción.

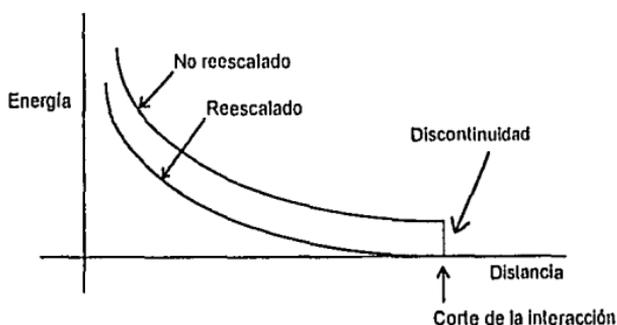
En el capítulo anterior se describió y demostró que con el método mejorado de búsqueda exhaustiva se puede obtener una lista completa de todas las configuraciones distintas posibles para una cobertura y una área determinada, así como evaluar la energía por partícula dada una ley para la interacción entre ellas. Utilizando este método, se estudiaron mallas cuadradas y triangulares con distintas coberturas y áreas.

Algunas de las coberturas y mallas estudiadas han sido descritas por otros autores [2], y se cotejan con los resultados obtenidos con este nuevo algoritmo, por esta razón los valores para el alcance y el área que se utilizaron en estos

cálculos son los mismos a los utilizados por estos autores en las coberturas correspondientes.

En mallas cuadradas y coberturas entre $1/2$ y $1/10$ se obtuvieron resultados iguales a los presentados en [2]. No así para las configuraciones presentadas en [13] para las que sólo algunos de sus resultados fueron correctos; para el resto se encontraron otras configuraciones con menor energía y sólo para dos coberturas ($1/30$ red triangular y $1/28$ red cuadrada) no se pudo decidir entre cuál configuración tenía energía menor.

Se estudiaron también las coberturas de la forma $2/q$ con $q = 5, 7, 11, 13, 15$ y 17 , que son intermedias a las coberturas $1/q$ con q de 2 a 9, de las cuales sólo se tenía una referencia, para mallas cuadradas y ninguna para mallas triangulares.



Gráfica III. 1 Comparación entre el potencial rescalado y el no rescalado.

Para todas las coberturas estudiadas se usó el potencial utilizado en [2] que es truncado y reescalado. Truncar el potencial es necesario porque con este método no es posible calcular la energía para alcance infinito.

Los resultados se presentan en tres secciones a) los resultados para mallas cuadradas, que se dividen en tres subsecciones: resultados para cobertura $1/2$ a $1/9$, resultados que concuerdan con los reportados en [13] y los que no coinciden con esta referencia (sección III.2), b) los resultados para redes triangulares se subdividieron de la misma manera que para redes cuadradas (sección III. 3) y c) resultados para coberturas de la forma $2/q$.

III. 2 Mallas Cuadradas .

III. 2. A. Coberturas de $1/2$ a $1/9$.

Las coberturas estudiadas son de la forma $1/q$ con q de 2 a 9, un alcance de seis pasos de red como el utilizado en [2] y áreas q , $2q$, $3q$ y $4q$. Las mallas que se encontraron se muestran en la figura III. 1 para $q = 2,3,4,5,8$ y 9 .

En esta figura se muestran tanto las configuraciones como sus vectores generadores, donde se puede notar que todos tienen la primera coordenada cero, lo que es una consecuencia del método descrito en la sección anterior. En todos estos casos la configuración de mínima energía fue la misma al estudiar las áreas q , $2q$, $3q$ y $4q$, lo que hace que ninguno de ellos tenga decoraciones.

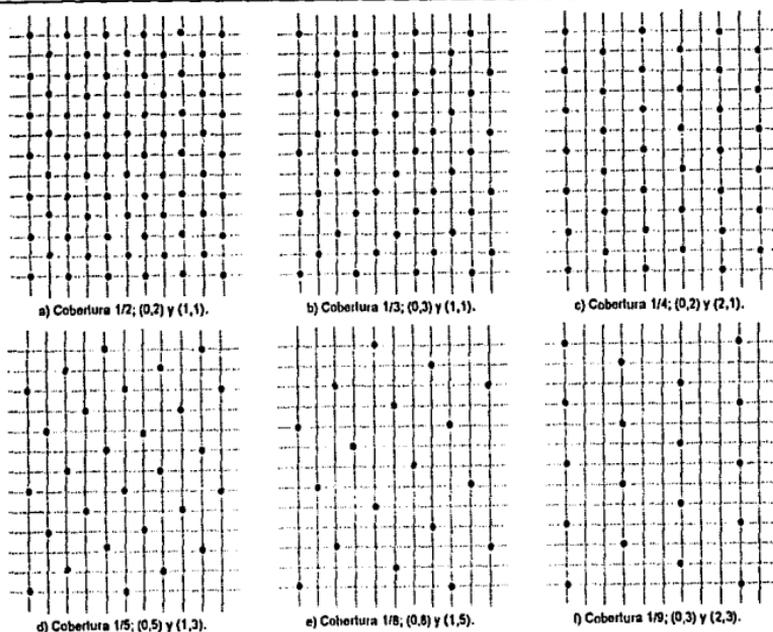
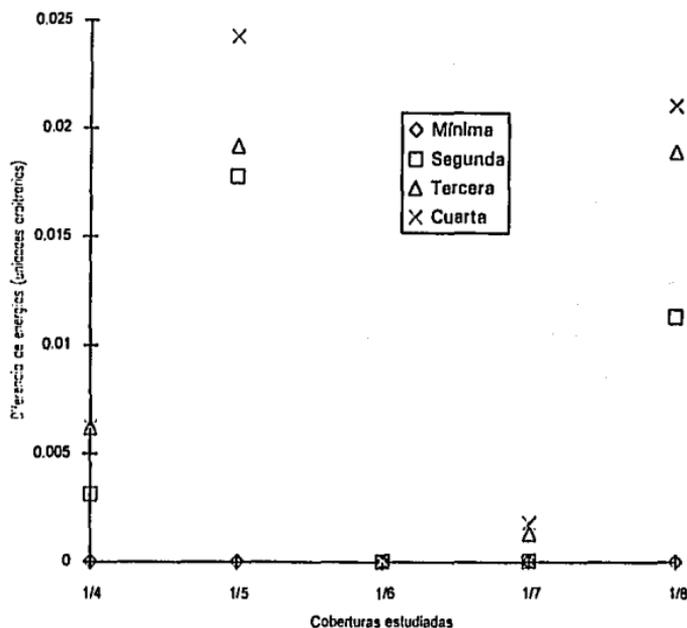


Figura III. 1 Resultados para coberturas $1/2$, $1/3$, $1/4$, $1/5$, $1/8$ y $1/9$.

En el caso de $q = 6$ y 7 los resultados obtenidos muestran en forma clara la existencia de degeneración (es decir, dos o más configuraciones distintas con energías iguales) [2]. Esto es evidente al ordenar la lista de todas las mallas posibles de acuerdo a su energía, lo que no sucede en el resto de las coberturas estudiadas.



Gráfica III. 2 Diferencias de energía vs cobertura.

Esto se puede apreciar en la gráfica III. 2 donde se presenta para cada cobertura la diferencia entre la energía de la configuración mínima y la energía de las cuatro primeras configuraciones en la lista ya ordenada. Lo que se hace sólo para las coberturas presentadas porque en los casos restantes la diferencia es mucho mayor y no cabe el resultado en la gráfica.

En la fig. III. 2 se muestran las dos primeras mallas de energía más baja que se obtuvieron para las cobertura 1/6 y 1/7 las letras a) y c) corresponden a

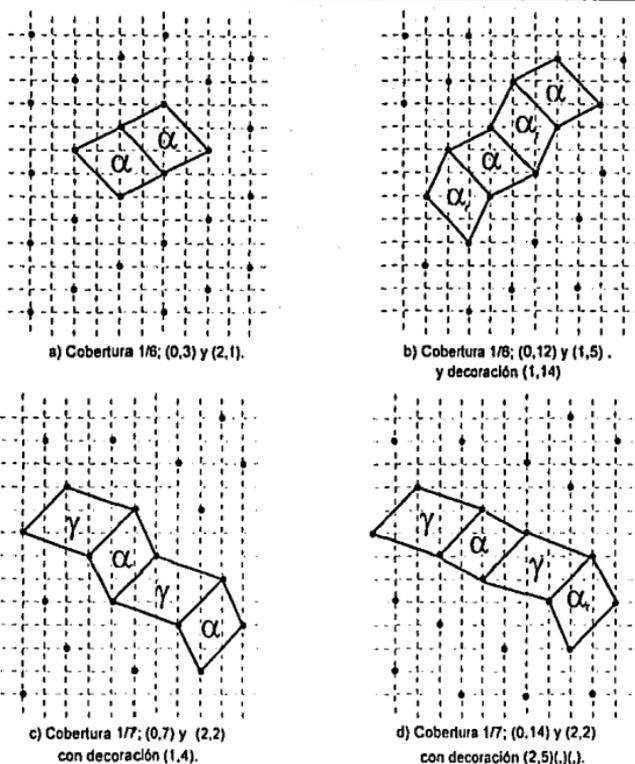


Figura III. 2 Las dos primeras configuraciones para coberturas $1/6$ y $1/7$.

las configuraciones de mínima energía, y b) y d) son las segundas configuraciones en la lista ordenada. En a) se marcó la celda generadora con la letra α , esta celda mantiene su posición al trasladarse, en cambio en b) la misma celda α aparece tanto en la posición de a) como reflejada (marcada con α'). Más adelante se verá que hay coberturas para las cuales la configuración que combina una celda y su

reflejada, no solo tenía una energía cercana a la mínima sino que puede tener energía menor que la configuración que se genera con celda única.

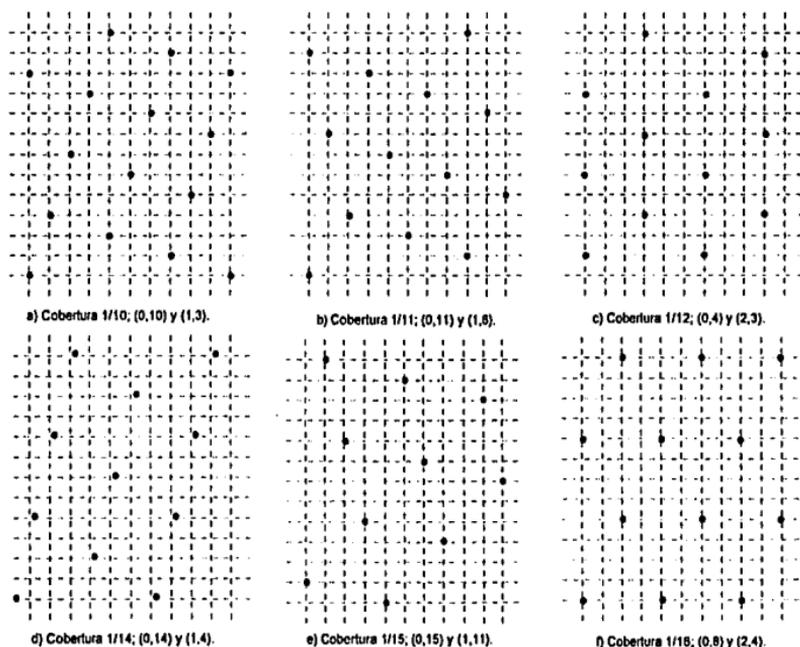


Figura III. 3 Configuraciones que coinciden con las propuestas en [13] (continua).

III. 2. B. Configuraciones que coinciden con las reportadas por Shinjo & Sasada [13].

Para coberturas de la forma $1/q$ con q de 10 a 30 se estudió hasta dos veces el área, con un alcance de 15 pasos de red.

No fue posible realizar la búsqueda exhaustiva para 3 y 4 veces el área debido a la gran cantidad de tiempo de cómputo necesario para estos cálculos,

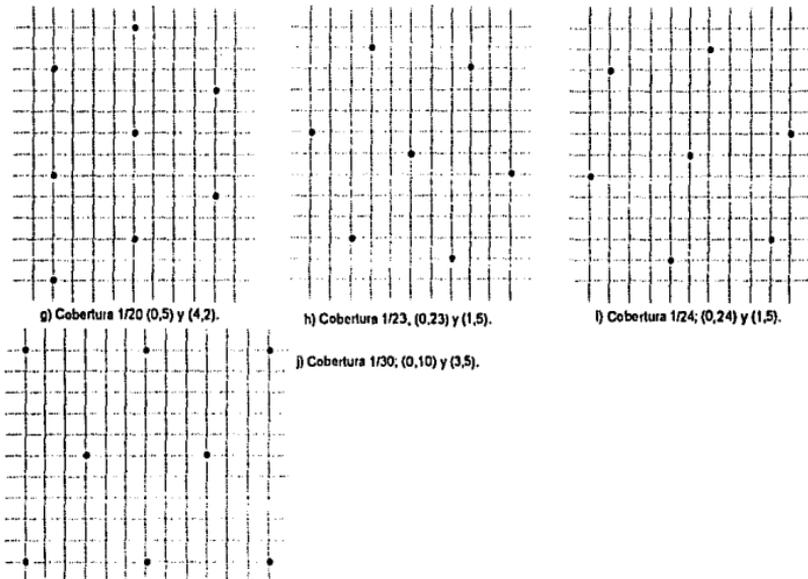


Figura III. 3 Configuraciones que coinciden con las propuestas en [13].

pues el número de casos crece de forma exponencial y el tiempo para hacer la eliminación de las mallas iguales no es predecible, ya que depende de cuántas configuraciones iguales existen, dato que se conoce hasta el momento en que se ha terminado de ejecutar el programa. Los resultados que aquí se presentan coinciden con los reportados en [13] y se muestran en la figura III. 3.

Las coberturas para las que se obtuvo el mismo resultado que el reportado en [13] son: $1/10$, $1/11$, $1/12$, $1/14$, $1/15$, $1/16$, $1/20$, $1/23$, $1/24$ y $1/30$. Para todas ellas la configuración de mínima energía resultó ser la misma al calcular con una y dos veces el área, esto es, se pueden representar sin necesidad de utilizar decoraciones.

Para estas configuraciones no se hizo una gráfica de las diferencias de energía entre la de energía mínima y las primeras en la lista ordenada, porque el resultado no es claro con un cálculo que involucra sólo dos veces el inverso de la cobertura.

III. 2. C. Configuraciones que no coinciden con las reportadas por Shinjo & Sasada [13].

En [13] se proponen configuraciones para coberturas $1/q$ con q de 1 a 30 para la red cuadrada, de ellas se encontró resultados nuevos para las coberturas $1/7$, $1/13$, $1/17$, $1/18$, $1/19$, $1/21$, $1/22$, $1/25$, $1/26$, $1/27$, $1/28$ y $1/29$. Las configuraciones se presentan de la fig. III. 4 a fig. III 15. En todas ellas se ha dibujado también las configuraciones reportadas en [13], con la finalidad de poder comparar entre ellas.

Para verificar que las configuraciones obtenidas tienen una energía menor a las reportadas, se ha calculado la energía de ambas configuraciones para

distintos valores del alcance. Los resultados se muestran en las gráficas III. 3 a III. 14.

En todas estas gráficas se tomó la energía de la configuración reportada menos la energía de la configuración obtenida en esta tesis. Excepto para la cobertura $1/28$ las gráficas tiende a un valor mayor que cero, esto es la configuración obtenida en este trabajo tiene una energía menor a la reportada en [13].

La configuración de energía mínima para cobertura $1/7$ esta formada por la combinación de dos paralelogramos, uno de área 6 y otro de área 8, que son los generadores de las mallas de energía mínima para coberturas de $1/6$ y $1/8$, este tipo de combinación se observa nuevamente en las coberturas $1/13$, $1/17$, $1/19$, $1/21$, $1/27$ y $1/29$ donde las configuraciones con cobertura $1/q$ están formadas por combinación de los rombos que generan las configuraciones con coberturas $1/(q-1)$ y $1/(q+1)$.

En las figuras III. 4 a III. 15 se dibujaron estos rombos para hacer más clara esta característica.

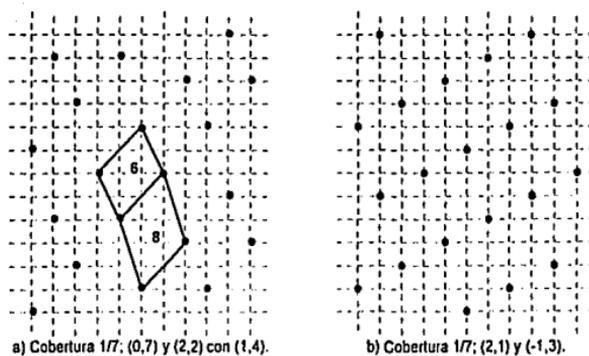
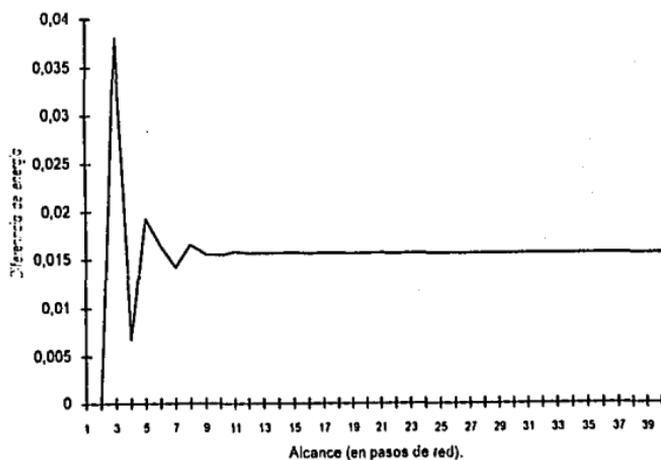


Figura III. 4 a) configuración calculada y b) reportada [13] para $1/7$.



Gráfica III. 3 Diferencias de energía entre la configuración encontrada y la reportada en [13] para cobertura $1/7$. De igual manera hasta la gráfica III. 14.

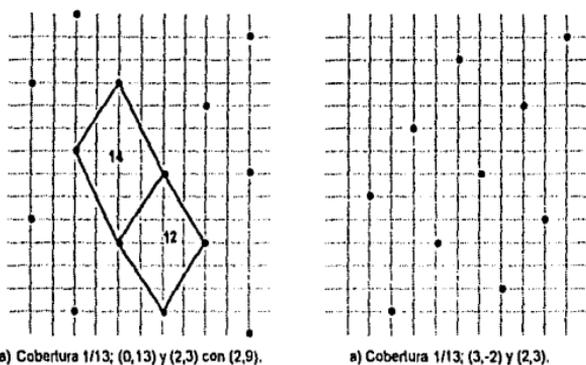
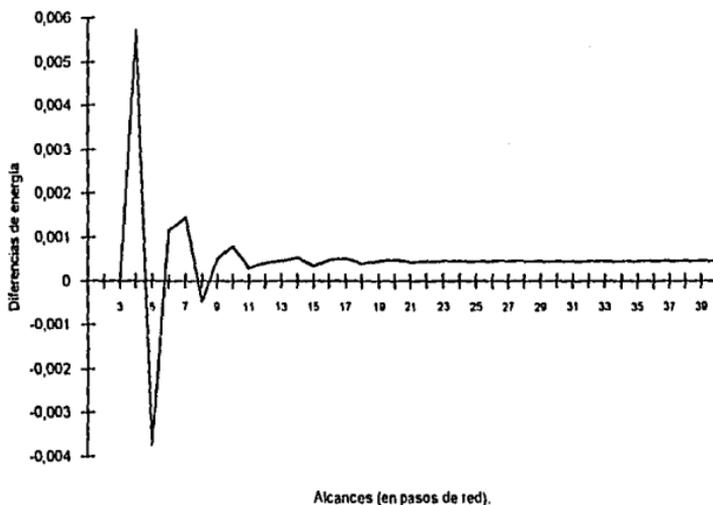


Figura III. 5 a) Configuración calculada y b) reportada en [13] para 1/13.



Gráfica III. 4 Diferencias de energía para cobertura 1/13.

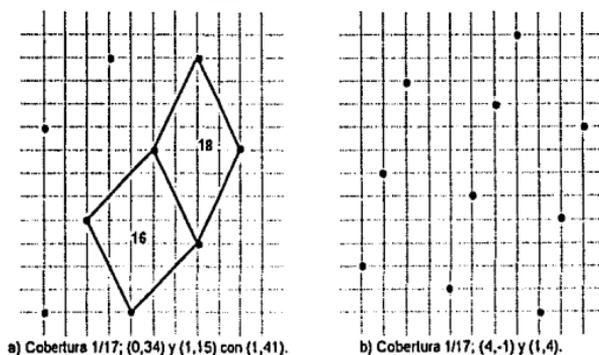
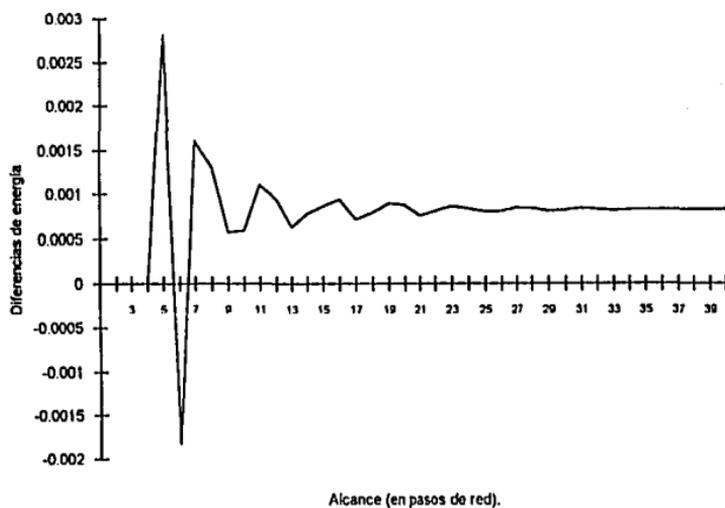


Figura III. 6 a) Configuración calculada y b) reportada en [13] para 1/17.



Gráfica III. 5 Diferencias de energía para cobertura 1/17.

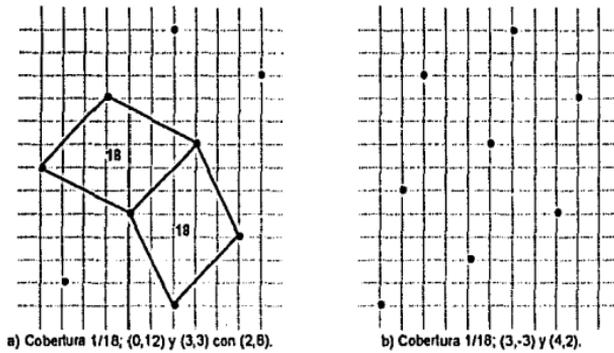
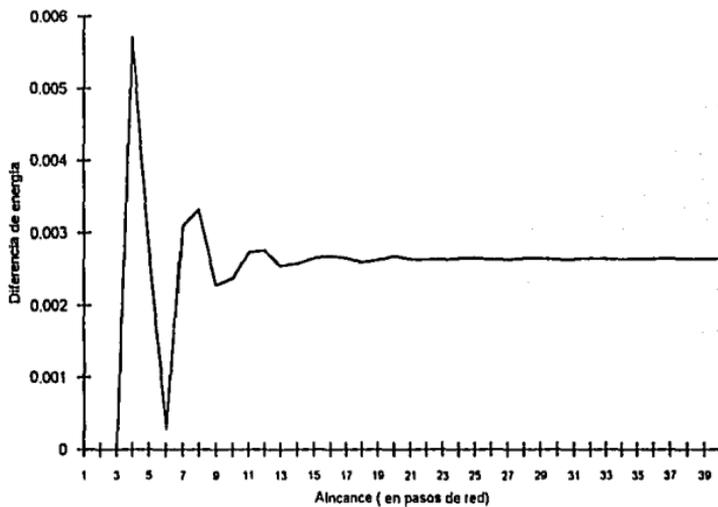


Figura III. 7 a) Configuración calculada y b) reportada en [13] para 1/18.



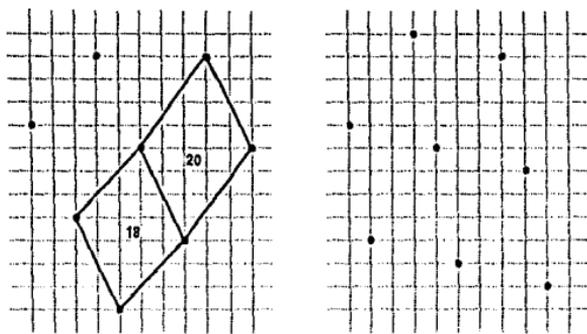
Gráfica III. 6 Diferencias de energía para cobertura 1/18.

En el caso de cobertura $1/18$, $1/28$ y $1/30$ la configuración de energía mínima esta formada por un sólo tipo de paralelogramo y su reflejado, como el descrito para cobertura $1/6$. Estos paralelogramos se utilizan en otras configuraciones como celdas de energía mínima, por ejemplo la configuración con cobertura $1/29$ está formada por el paralelogramo de área 28 y uno de área 30.

El único paralelogramo nuevo que aparece es el de área 22 en la configuración de energía mínima para cobertura $1/21$. En este caso la configuración de energía mínima para $1/22$ está compuesta de dos paralelogramos, uno de área 20 y otro de área 24. Esta configuración no puede formarse por paralelogramos de área 21, por que la configuración de energía mínima para cobertura $1/21$ está compuesta por dos celdas unitarias.

Esta situación se presenta nuevamente para la configuración con cobertura $1/26$ que está formada por dos paralelogramos de área 24 y 28. No es posible que se forme de un paralelogramo de área 27 porque la configuración de energía mínima para cobertura $1/27$ está a su vez formada por dos paralelogramos de área 26 y 28.

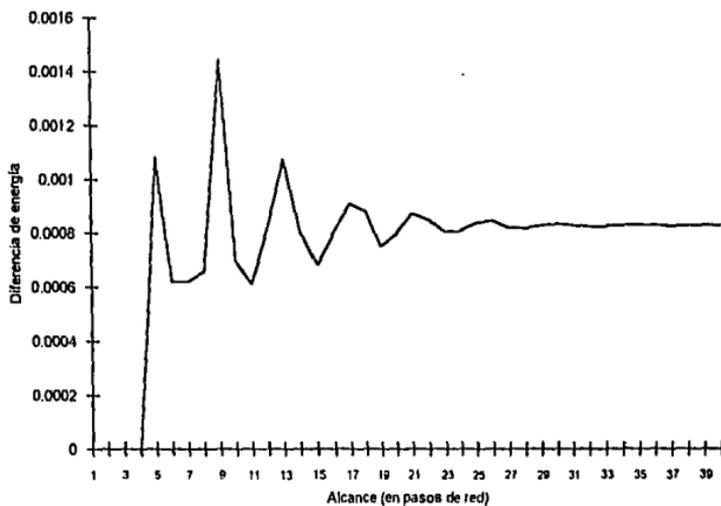
Sólo para cobertura $1/25$ se encontró una configuración que no necesita de decoraciones para ser descrita, esto es, que está formada unicamente por un paralelogramo de área 25.



a) Cobertura 1/19; (0,19) y (2,15) con (1,26).

a) Cobertura 1/19; (4,-1) y (3,4).

Figura III. 8 a) Configuración calculada y b) reportada en [13] para 1/19.



Gráfica III. 7 Diferencias de energía para cobertura 1/19.

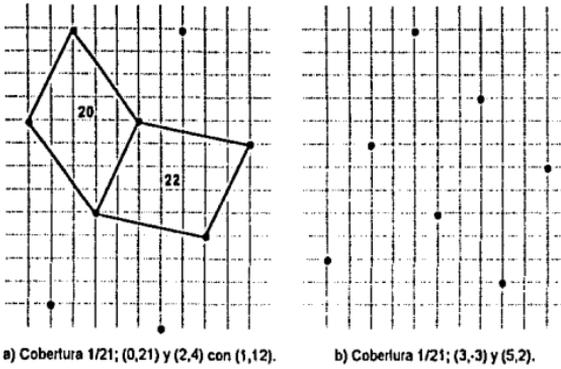
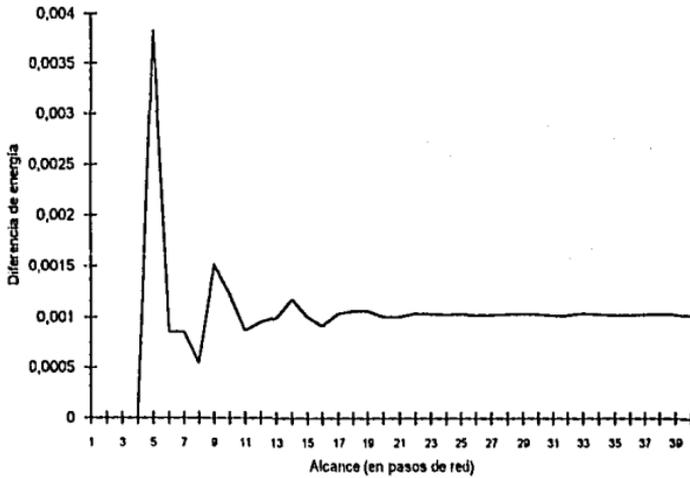


Figura III. 9 a) Configuración calculada y b) reportada en [13] para 1/21.



Gráfica III. 8 Diferencias de energía para cobertura 1/21.

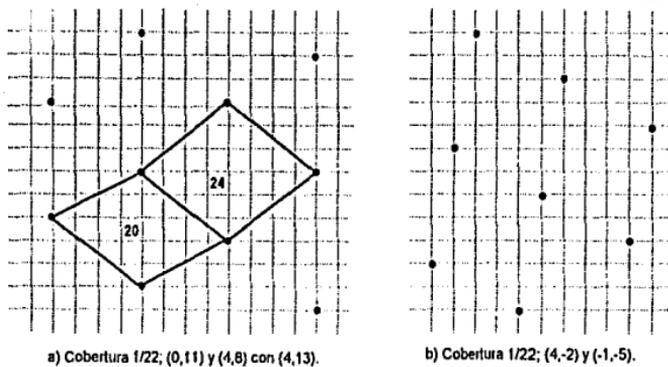
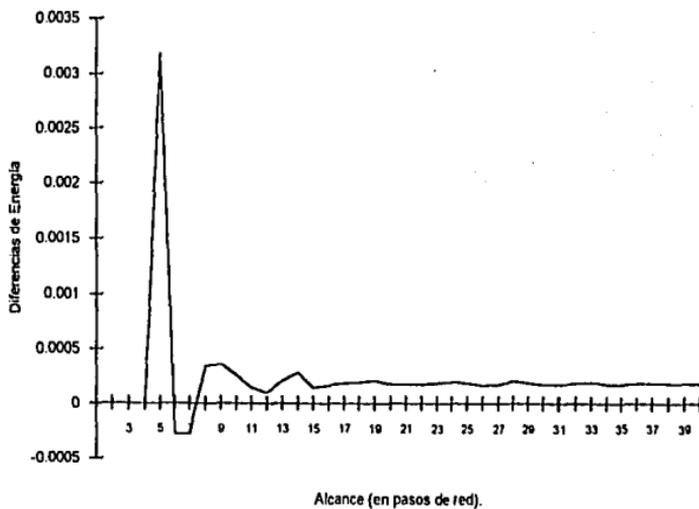


Figura III. 10 a) Configuración calculada y b) reportada en [13] para 1/22.



Gráfica III. 9 Diferencias de energía para cobertura 1/22.

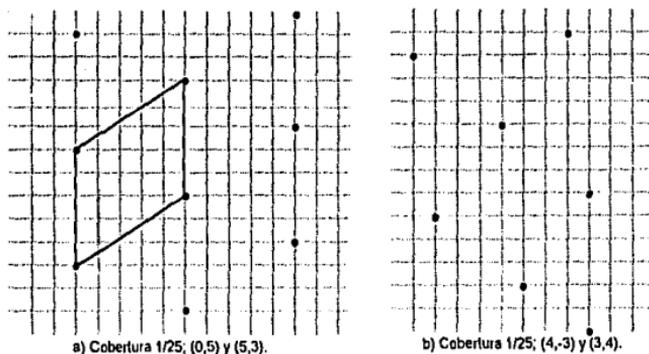
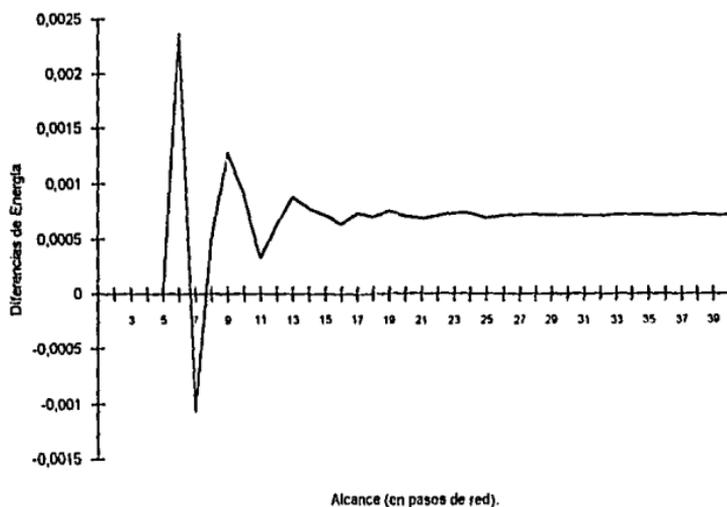


Figura III. 11 a) Configuración calculada y b) Configuración reportada en [13] para cobertura 1/25



Gráfica III. 10. Diferencias de Energía vs. Alcance para cobertura 1/25.

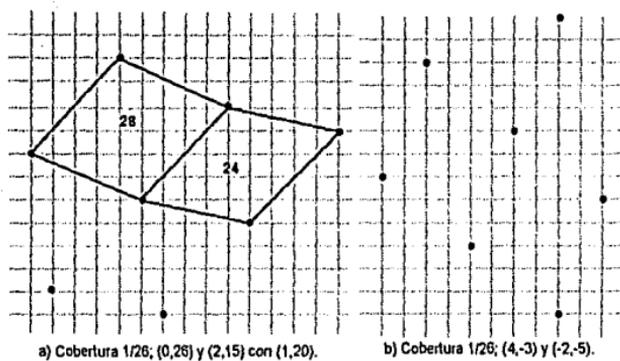
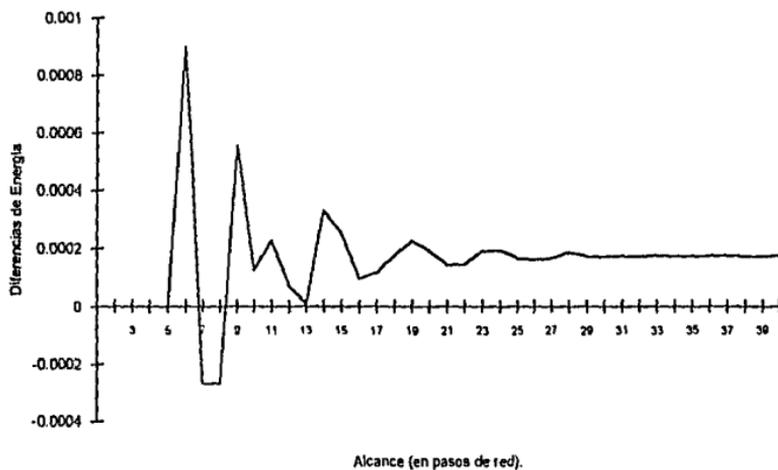


Figura III. 12 a) Configuración calculada y b) configuración reportada [13] para cobertura 1/26.



Gráfica III. 11 Diferencia de Energía vs. Alcance. Para cobertura 1/26.

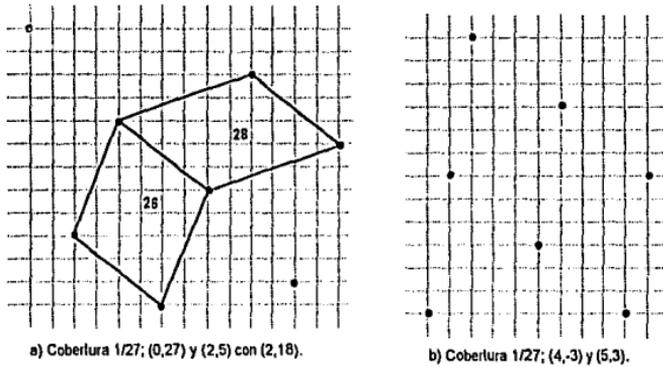
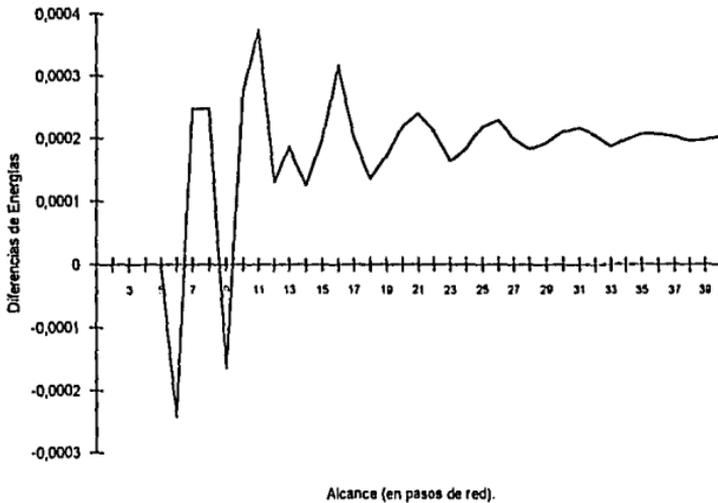


Figura III. 13 a) Configuración calculada y b) configuración reportada [13] para cobertura $1/27$.



Gráfica III. 12 Diferencias de Energías vs. Alcance para cobertura $1/27$.

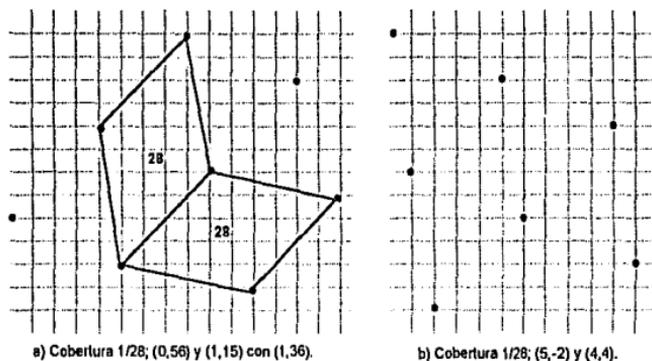
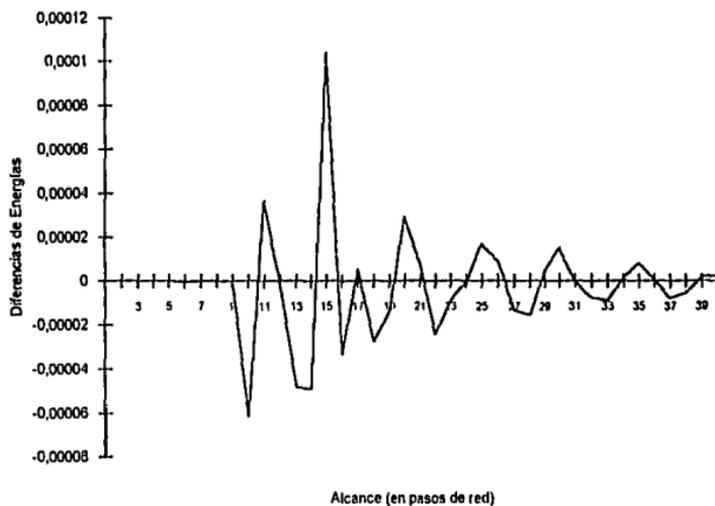


Figura III. 14 a) Configuración calculada y b) configuración reportada [13] para cobertura 1/28.



Gráfica III. 13 Diferencias de Energía vs. Alcance para cobertura 1/28.

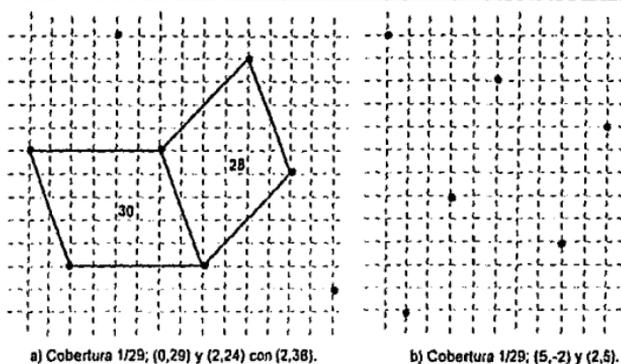
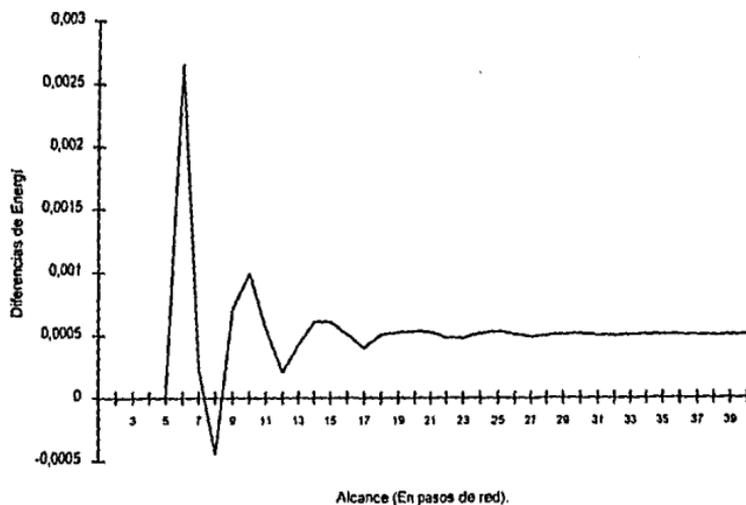


Figura III. 15. a) Configuración calculada y b) configuración reportada [13] para cobertura 1/29.



Gráfica III. 14 Diferencias de Energía vs Alcance para cobertura 1/29.

Para cobertura $1/28$ no fue posible decidir entre cual de las configuraciones tenía energía menor (la obtenida en este trabajo y la reportada en [13]), aquí se presenta nuevamente el efecto de la celda reflejada, que se explicó en el caso de cobertura $1/6$. Ambas configuraciones poseen energías muy parecidas al crecer el alcance (ver gráf. III. 12). Es este el único caso en el que se puede hablar de degeneración estrictamente.

III. 3 Mallas Triangulares.

III. 3. A. Configuraciones que coinciden con las reportadas por Shinjo & Sasada [13].

En este caso se estudiaron también coberturas de la forma $1/q$ con q de 1 a 30 y alcance de 6 pasos de red para q de 1 a 9 y de 15 para q de 10 a 30. Las áreas estudiadas fueron: hasta $4q$ para q de 1 a 10 y hasta $2q$ para q de 11 a 30. Las coberturas para las que se obtuvo las mismas configuraciones que las reportadas son: $1/2$, $1/3$, $1/4$, $1/6$, ..., $1/17$, $1/19$, $1/21$, $1/22$, $1/24$, ..., $1/28$. Se presentan en las fig. III. 6 y fig. III. 7.

Para las configuraciones entre $1/2$ a $1/9$ se construyó la gráfica de las primeras cuatro energías (en la lista de configuraciones ordenadas de acuerdo a la energía). Las configuraciones degeneradas resultaron ser la de $1/5$ y $1/6$ como se muestra en la gráfica III. 14.

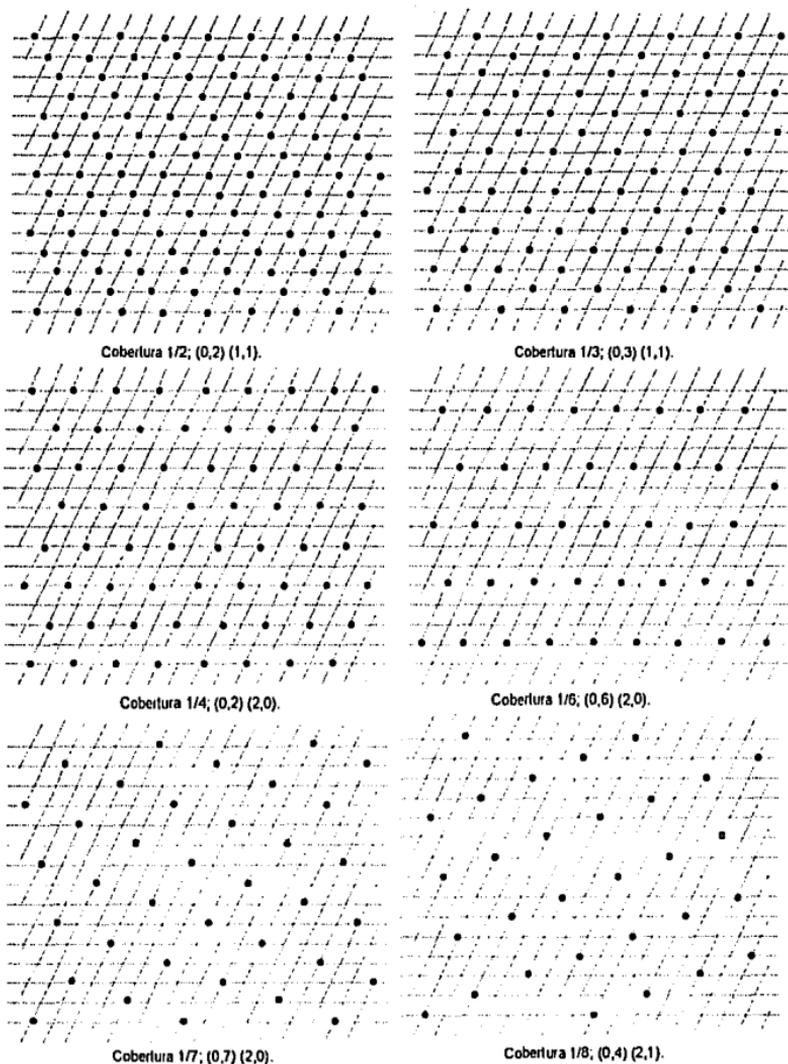


Figura III. 6. Resultados para cobertura $1/2$, $1/3$, $1/4$, $1/7$, $1/8$ (continua).

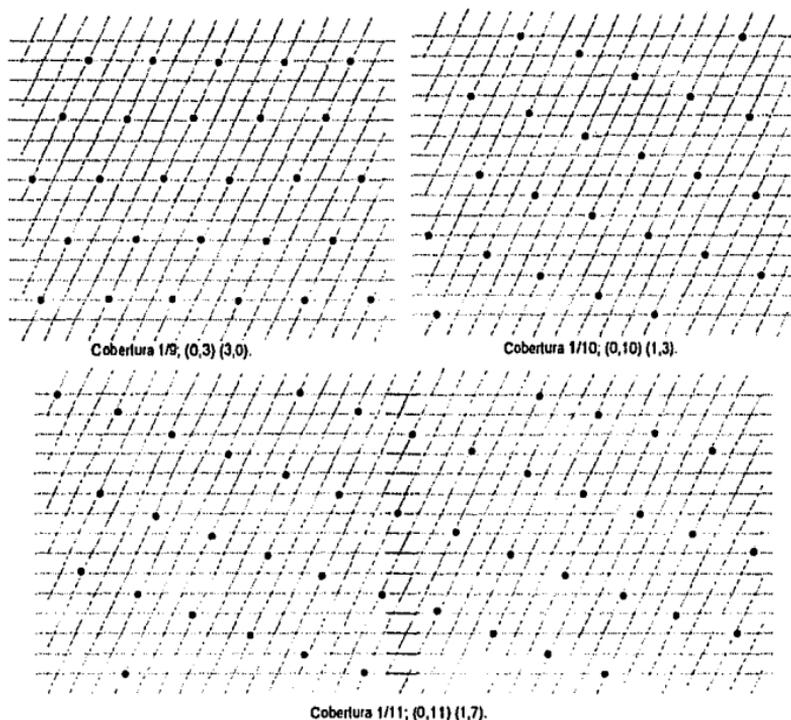


Figura III. 6. Resultados para cobertura $1/9$, $1/10$ y $1/11$ (continua).

Nuevamente la degeneración se debe a que las configuraciones con defectos tienen una energía similar a la malla de energía mínima (fig. III. 8).

En la fig. III. 8 b) se aprecia que nuevamente la configuración generada con dos celdas reflejadas tiene una energía muy parecida a la configuración de energía mínima. Y para convertir de una a otra malla es necesario, nuevamente, hacer una translación de algunas de las franjas de la malla.

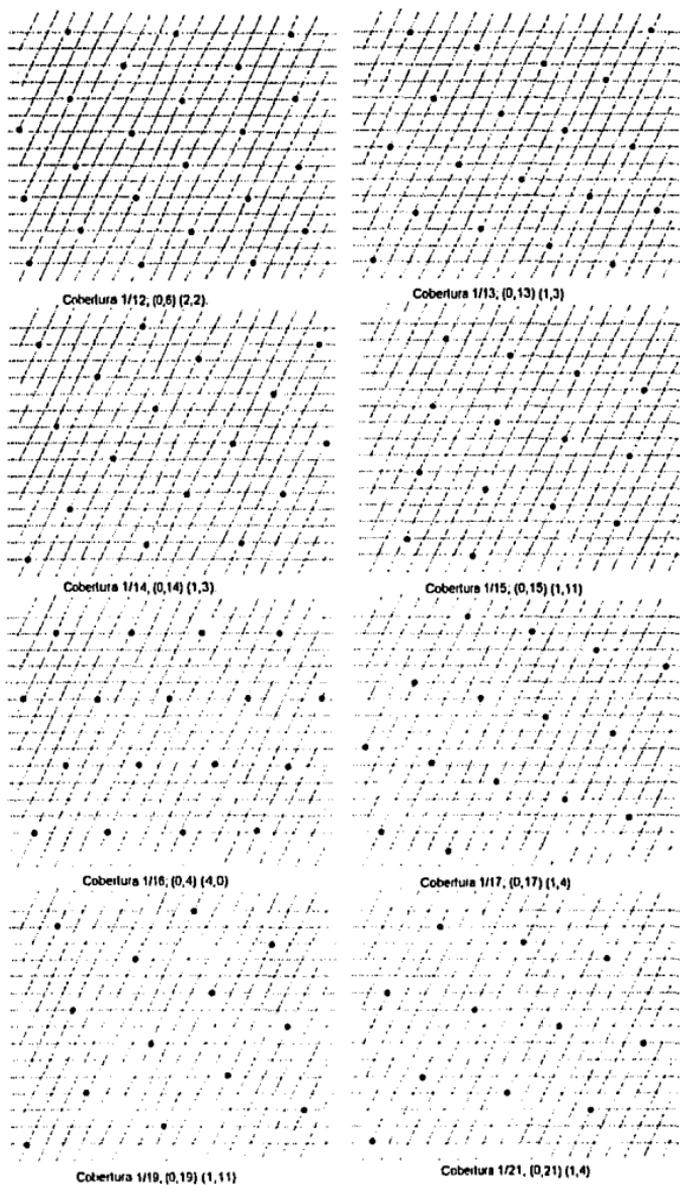
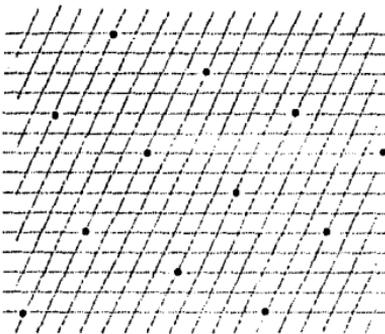
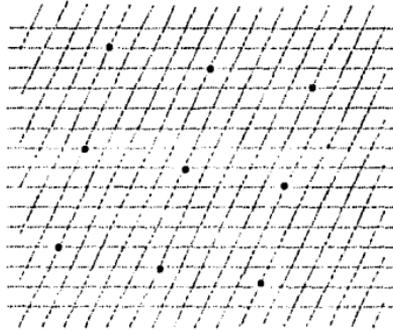
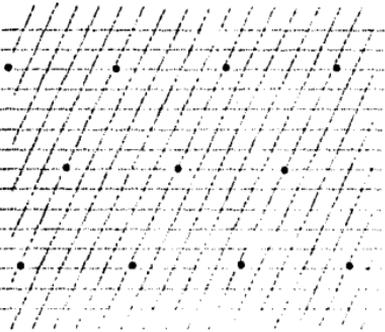
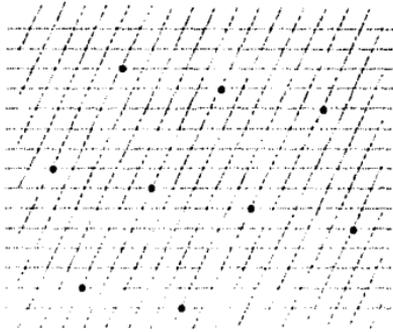
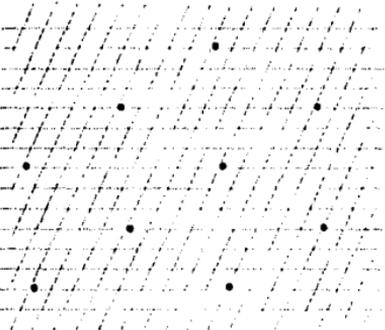
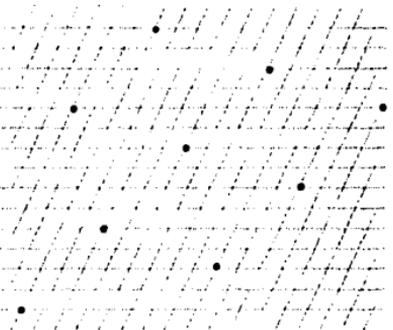
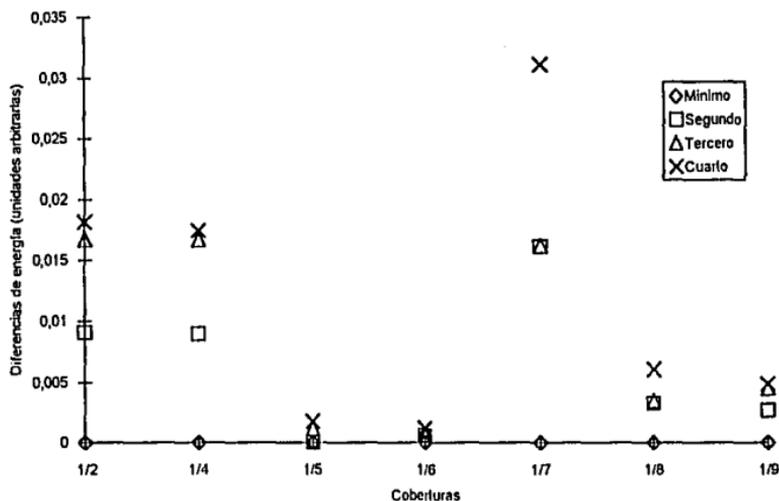


Figura III. 6. Resultados para cobertura 1/12, 1/13, 1/14, 1/15, 1/16, 1/17, 1/19 y 1/21 (continua).

Cobertura $1/22$; $(0,22)$ $(1,4)$.Cobertura $1/24$; $(0,24)$ $(1,20)$.Cobertura $1/25$; $(0,5)$ $(5,0)$.Cobertura $1/26$; $(0,26)$ $(1,5)$.Cobertura $1/27$; $(0,9)$ $(3,3)$.Cobertura $1/28$; $(0,14)$ $(2,4)$.Figura III. 6. Resultados para cobertura $1/22$, $1/24$, $1/25$, $1/26$, $1/27$ y $1/28$.



Gráfica 15. Degeneración en la red triangular.

III. 3. B. Configuraciones que no coinciden con las triangulares reportadas por Shinjo & Sasada [13].

Para las coberturas $1/5$, $1/18$, $1/20$, $1/23$, $1/29$ y $1/30$ se encontraron configuraciones con menor energía que las reportadas, estas se presentan en las figuras III. 19 a III. 24.

Al igual que en la red cuadrada las configuraciones $1/5$, $1/18$, $1/20$ y $1/29$ están formadas por paralelogramos que son generadores de las configuraciones de energía mínima para otras coberturas.

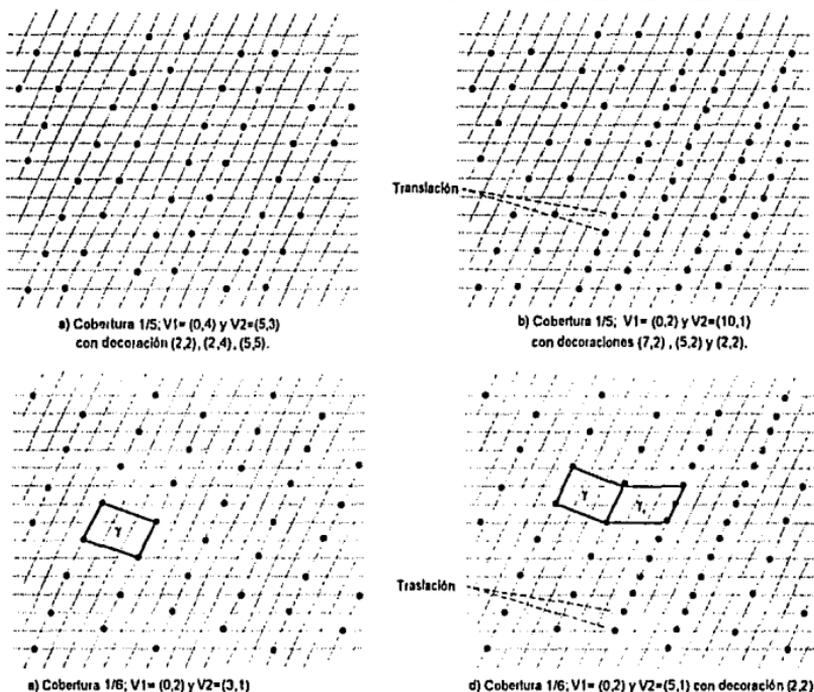


Figura III. 8 Las dos primeras configuraciones para cobertura 1/5 y 1/6.

Con la finalidad de comparar entre las mallas obtenidas y las reportadas en [13] se realizó un análisis de ambas configuraciones, calculando la energía para distintos alcances. Se graficó nuevamente las diferencias de energía en cada caso. Las gráficas corresponden de la III. 16 a la III. 21.

Sólo para cobertura 1/30 no fue posible decidir entre cual de las configuraciones tenía energía menor, y nuevamente este es el único caso en el que podemos hablar estrictamente de degeneración.

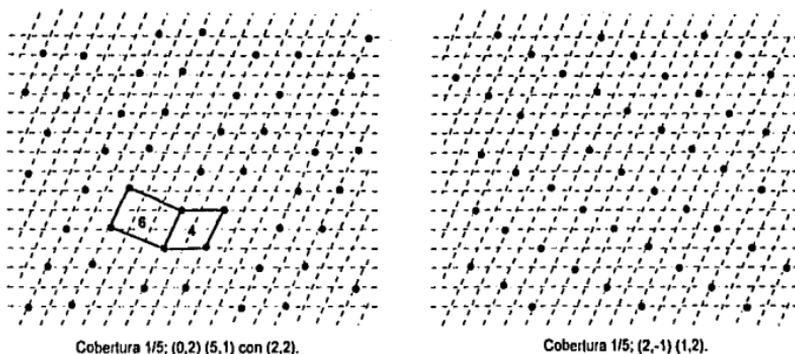
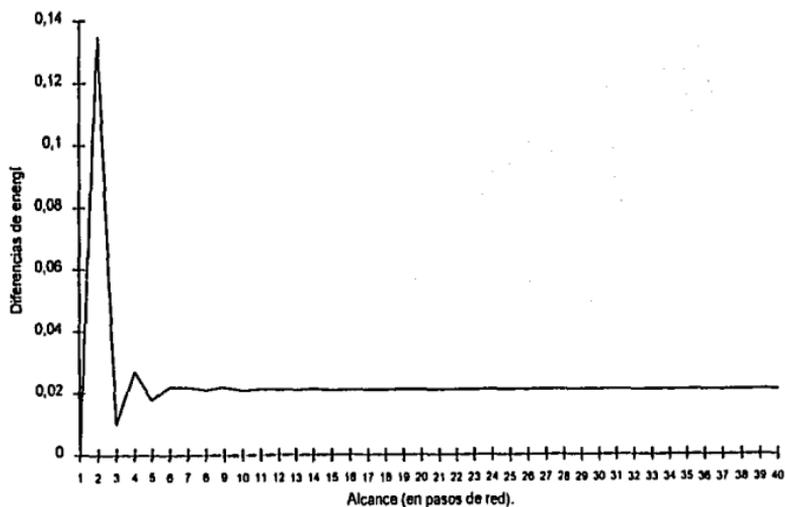


Figura III. 19 a) Configuraciones calculada y b) reportada en [13] para cobertura 1/5.



Grafica III. 16. Diferencias de Energía entre la configuración encontrada y la reportada vs. Alcance para cobertura 1/5.

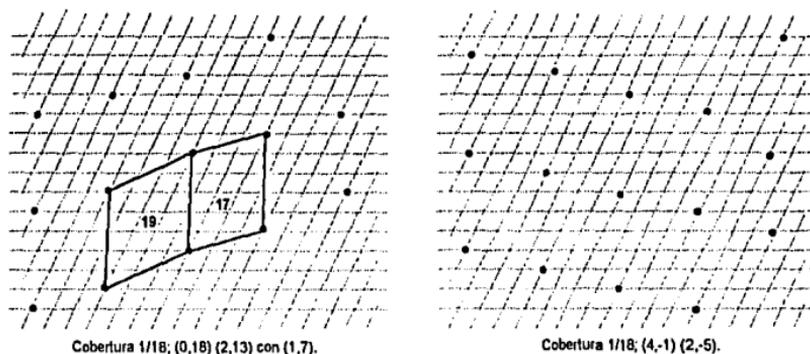
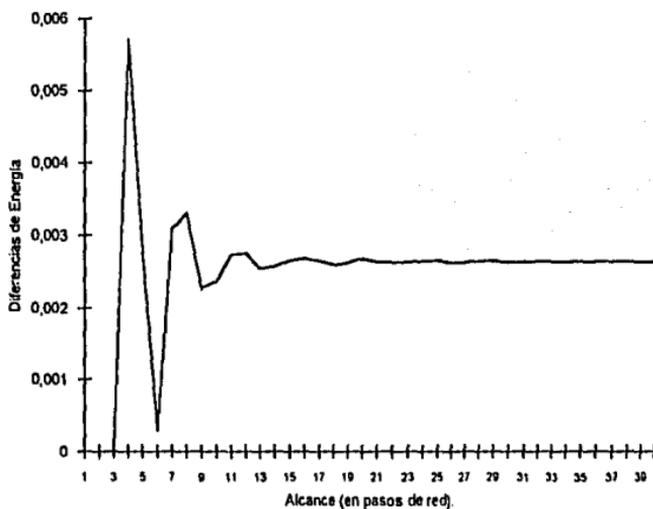


Figura II. 20 a) Configuración calculada y b) configuración reportada por Shinjo & Sasada [13] para cobertura 1/18.



Gráfica III. 17 Diferencias de Energía vs. Alcance para cobertura 1/18.

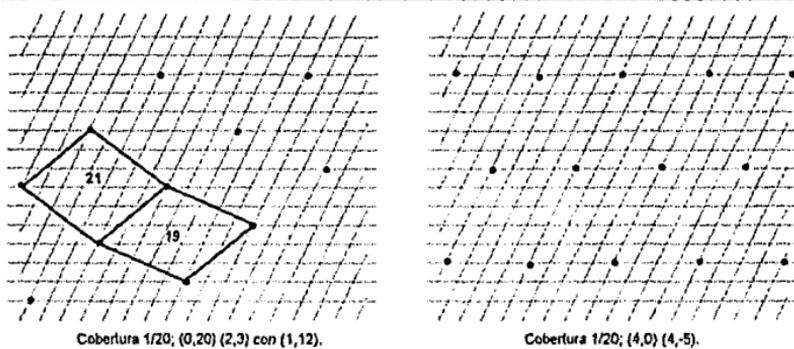
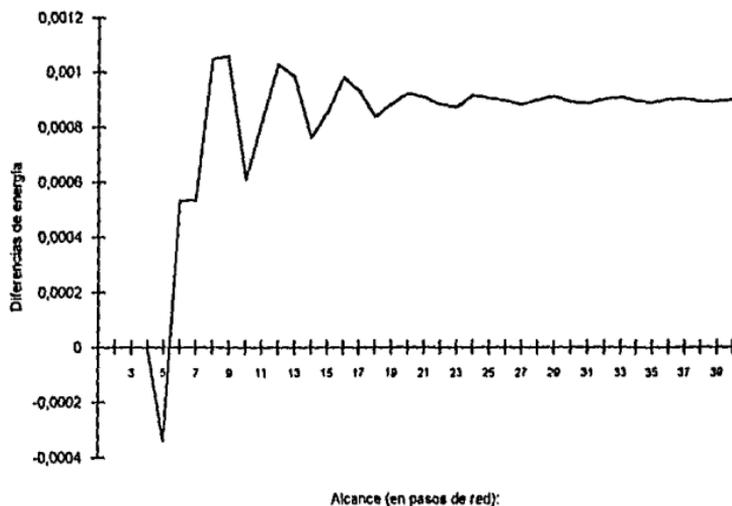


Figura III. 21. a) Configuración calculada y b) configuración reportada [13] para cobertura 1/20.



Gráfica III. 7 Diferencias de Energía vs. Alcance para cobertura 1/20.

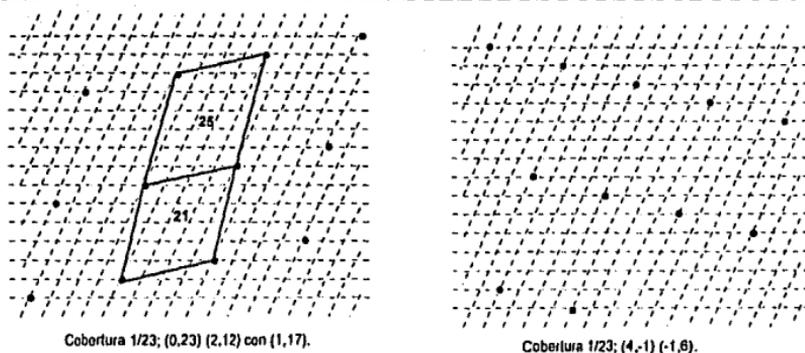
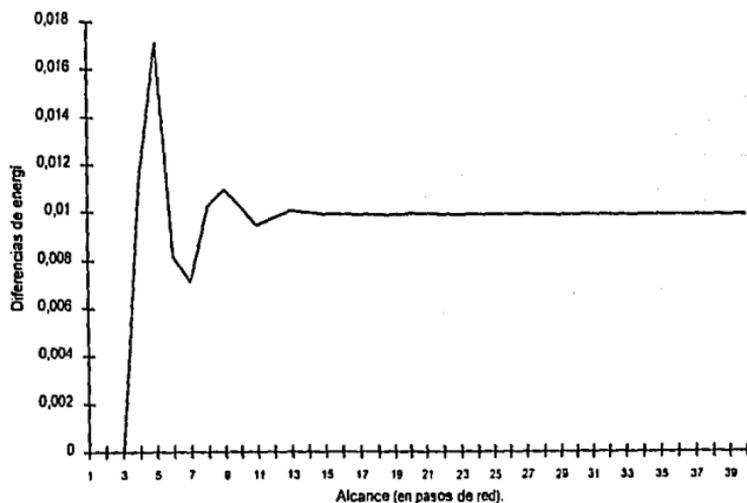


Figura III. 22. a) Configuración calculada y b) configuración reportada en [13] para cobertura 1/23.



Gráfica III. 19. Diferencias de Energía vs. Alcance para cobertura 1/23.

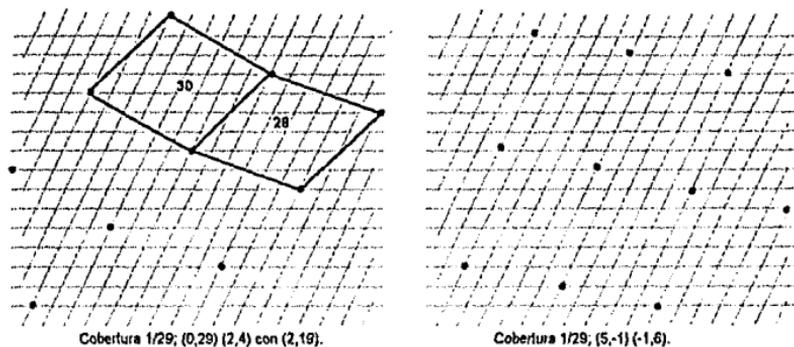
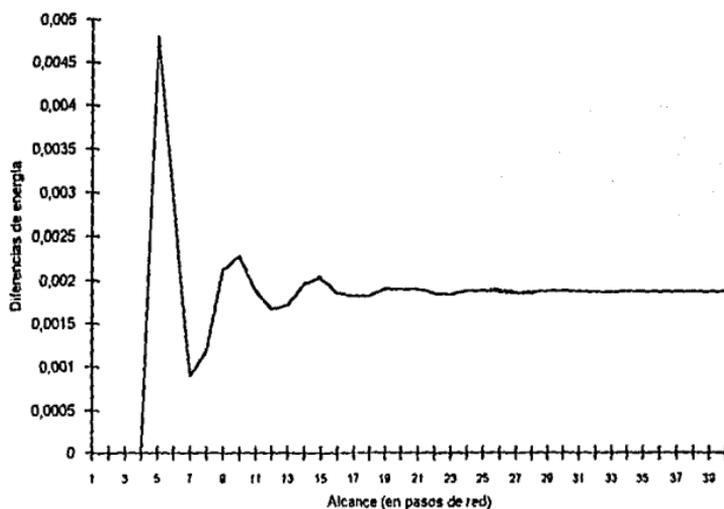


Figura III. 23. a) Configuración calculada y b) configuración reportada [13] para cobertura 1/29.



Gráfica III. 17 Diferencias de Energía vs. Alcance para cobertura 1/29.

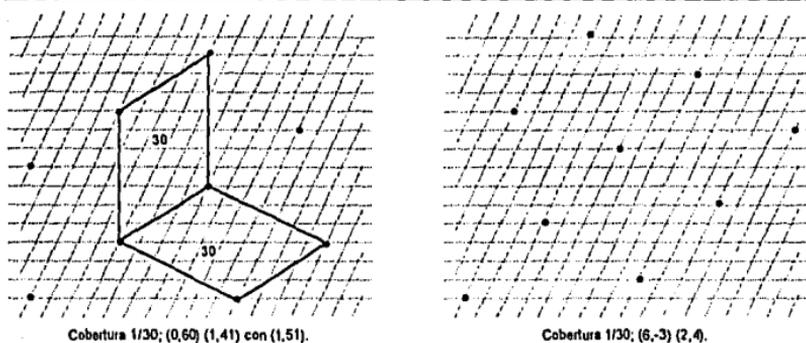
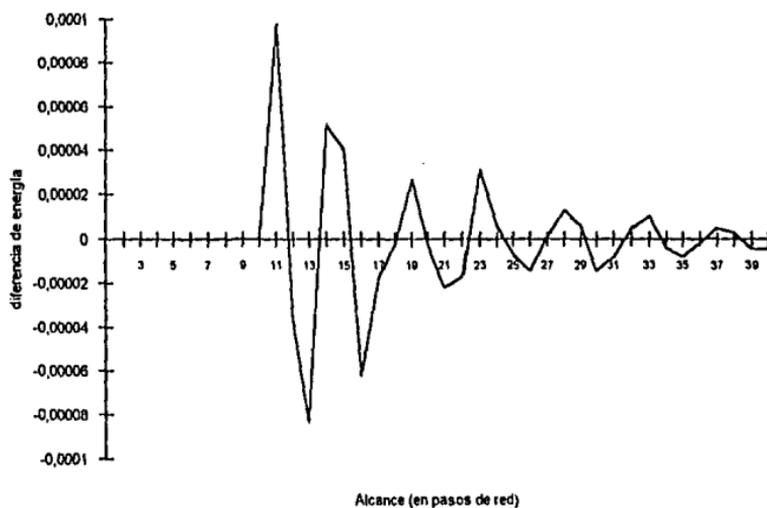


Figura III. 24 a) Configuración calculada y b) configuración reportada [13] para cobertura 1/30.



Gráfica III. 21 Diferencias de Energía vs. Alcance para cobertura 1/30.

En el caso de cobertura $1/23$ no está formado por paralelogramos de áreas 22 y 24, ya que estas no poseen ningún lado en común lo que obliga a que se forme con paralelogramos de áreas 21 y 25.

Para estas coberturas estudiadas, sólo la de $1/30$ está formada por una celda que se refleja, como en los casos anteriores para coberturas $1/6$ en red cuadrada.

En la red cuadrada hay más configuraciones de energía mínima que necesitan decoraciones para su representación que en la red triangular, esto se debe principalmente a que las simetrías de la red triangular son más y el número de mallas posibles es menor, además la red triangular tiende a formar hexágonos de forma muy natural.

Aparece nuevamente una configuración para la cual no es posible decidir entre cual de las configuraciones tiene menor energía. La gráfica de cobertura $1/30$ indica que ambas tienen la misma energía cuando el alcance crece.

III. 4. Resultados para coberturas $2/q$.

Por último se estudiaron las coberturas de la forma $2/q$ con $q = 5, 7, 9, 11, 13, 15$ y 17 . Con un alcance de 15 pasos de red y hasta dos veces el área. Los resultados se muestran en la figura III. 25 para mallas cuadradas y en la fig. III. 26 para mallas triangulares.

Para la red cuadrada y coberturas $2/5$, $2/7$, $2/11$ y $2/17$ se obtiene un ordenamiento que se forma a partir de los paralelogramos que constituyen la configuración de mínima energía para coberturas $1/r$ y $1/s$ adyacentes a $2/q$. Por ejemplo: para la cobertura $2/7$ se forma de los paralelogramos con área 3 y 4. que corresponden a las configuraciones de mínima energía.

Para cobertura $2/9$ aparece por primera vez una estructura de estrella (fig. III. 25 c) formada también por rombos que corresponden a configuraciones de energía mínima.

Al aplicar el criterio descrito en los párrafos anteriores a coberturas con $q = 13$ y 15 necesitamos del paralelogramo que se forma para una cobertura de $1/7$ pero si se revisan los resultados de las secciones anteriores se puede ver que tal paralelogramo no existe, porque la configuración de energía mínima para cobertura $1/7$ está formada por dos rombos distintos, uno de área 6 y otro de área 8. Entonces las coberturas $2/13$ y $2/15$ se forman por combinaciones de rombos de área 6 y 8. Para $2/13$ se forma a partir de tres rombos de área 6, uno de área 8 y para $2/15$ tres de área 8 uno de área 6 (ver fig. III. 25 e) y f).

Para la red triangular se cumple el criterio anterior para las coberturas, $2/5$, $2/7$, $2/13$ y $2/17$. Y se presenta nuevamente la estructura de estrella para una cobertura de $2/15$.

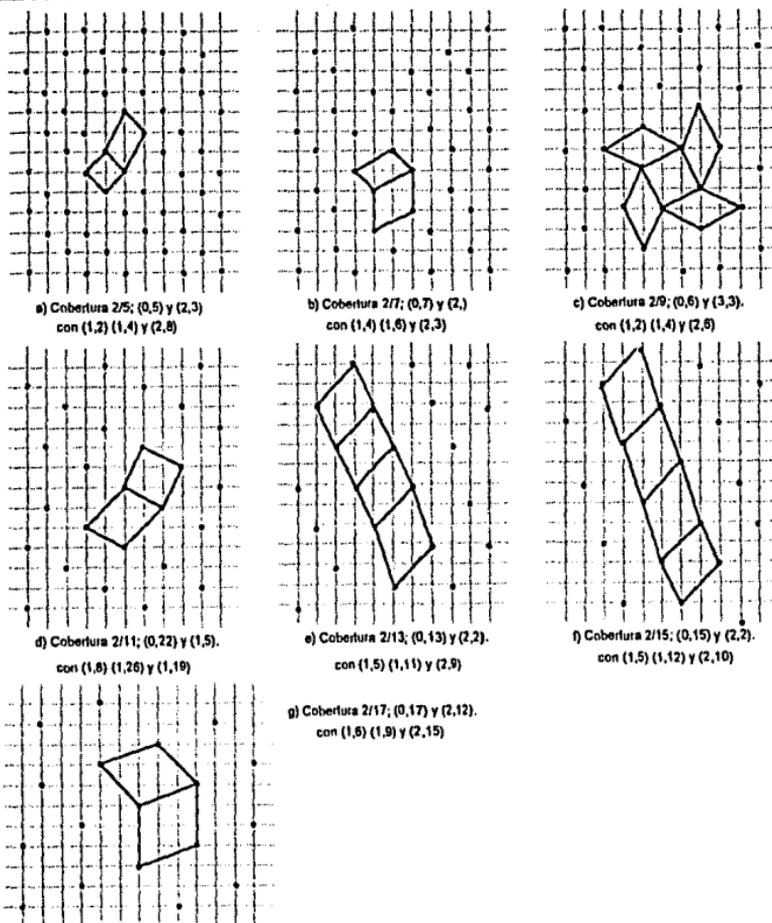
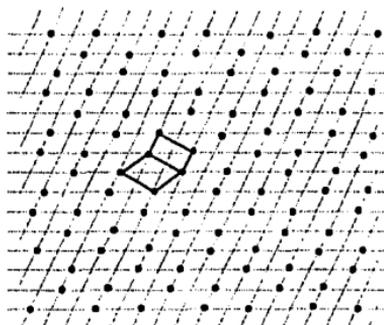


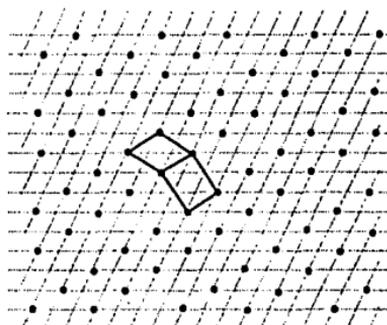
Figura III. 11 Resultados para coberturas en red cuadrada 2/5, 2/7, 2/9, 2/11, 2/13, 2/15 y 2/17.

Al aplicar el criterio a las coberturas 2/9 y 2/11 se necesita del rombo de la cobertura 1/5, que nuevamente no existe. Más aquí no se aprecia el mismo

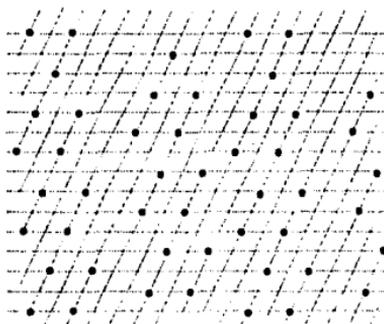
comportamiento que en la red cuadrada. Sino que aparece una combinación complicada de celdas de área 4 con otras no antes encontradas.



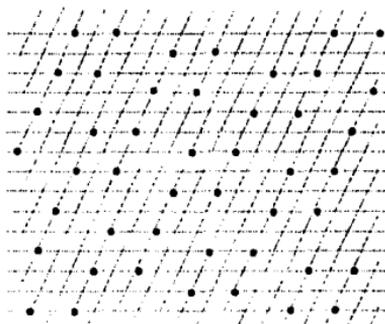
Cobertura $2/5$; $(0,5)$ $(2,4)$ con $(1,2)$, $(1,6)$ y $(2,8)$.



Cobertura $2/7$; $(0,7)$ $(2,2)$ con $(1,1)$ $(1,5)$ y $(2,6)$.



Cobertura $2/9$; $(0,187)$ $(1,7)$ con $(1,9)$ $(1,11)$ $(1,23)$.



Cobertura $2/11$; $(0,22)$ $(1,13)$ con $(1,15)$ $(1,17)$ y $(1,33)$.

Figura III. 12 Resultados para coberturas en red triangular $2/5$, $2/7$, $2/9$ y $2/11$.

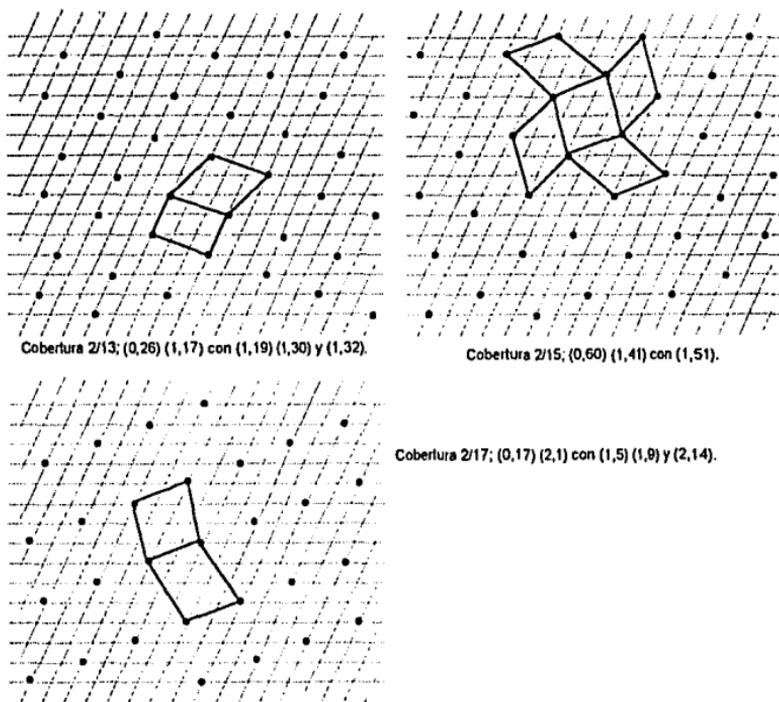


Figura III. 12 Resultados para coberturas en red triangular $2/13$, $2/15$ y $2/17$.

Capítulo IV

Discusión

...al reunir los datos que hemos recogido con nuestros sentidos, al integrarlos en nuestra inteligencia estamos creando nosotros la silla. Esto es lo que representan el Arte Alquímico, la Sagrada Cábala y la Tercera Ciencia: La creación de la Naturaleza en nuestro pensamiento.

Ruy Pérez Tamayo

IV. 1. Introducción.

En los capítulos II y III se ha mostrado como se consiguieron los objetivos de esta tesis. En el primero de ellos se describió el algoritmo utilizado para obtener todas las configuraciones distintas dada una cobertura y un área, además de ordenarlas con respecto a la energía asociada a cada configuración. En el capítulo III se muestran las configuraciones de energía mínima para redes cuadradas y triangulares. Primero se obtuvieron las configuraciones para las coberturas $1/q$ con q de 2 a 9 y se compararon con las reportadas en [2], obtenidas con el mismo método pero usando un algoritmo diferente. Para todas las coberturas se obtuvieron los mismos resultados. También se reportaron los

ordenamientos para coberturas $1/q$ con q de 10 a 30 para red cuadrada, y de 2 a 30 para red triangular. Las configuraciones obtenidas en este trabajo para coberturas $1/q$ con q de 1 a 30 fueron distintas en algunos casos a las reportadas en [13], por lo que se calculó la diferencia de energía entre los dos grupos de ordenamientos para alcances de 2 a 40 pasos de red. Por último se aplicó el método a coberturas de la forma $2/q$ con q impar de 3 a 17 para contrastar con la conjetura de Cocho [10].

En este capítulo se discute la tendencia general de los resultados obtenidos (IV. 2.), algunas características de los resultados para la red cuadrada (IV. 3.), para la red triangular (IV. 4.), la existencia de degeneración para cobertura $1/6$ (IV. 5.) y la Conjetura de Cocho (IV. 6.).

IV. 2. Tendencia general de los resultados.

En general los resultados tienen un comportamiento complicado y será necesario hacer más investigaciones y cálculos para predecir los ordenamientos que se generan para cada cobertura.

De los resultados del capítulo anterior, se puede notar que el comportamiento general en las soluciones para la malla unidimensional y las obtenidas para mallas bidimensionales se distinguen en que las soluciones para el caso unidimensional son simples de encontrar y se componen siempre de una celda mínima única, no así para el caso bidimensional en el que la solución puede estar determinada por más de una celda mínima y no es claro cuál es la regla que determina a estas configuraciones.

Este hecho contradice a las hipótesis propuestas en [8], [10] y [13] de que la solución podría determinarse a partir de una celda simple. En [8] se supone que los ordenamientos para coberturas $1/q$ estarán formados por celdas de área q . En

[10] se conjetura que las soluciones para coberturas $1/q$ son celdas simples que forman franjas en unas de las direcciones del plano y las configuraciones para coberturas p/q , con p distinta de 1, estarán formadas de combinaciones de celdas solución para los casos $1/q$ y ordenadas de acuerdo a la solución para el caso unidimensional; y en [13] se supone que las soluciones estarán constituidas por celdas primitivas simples lo más próximas a las que generen arreglos tipo hexagonal.

Para las coberturas estudiadas en la red cuadrada un 37% de las soluciones no se pueden describir a partir de una celda primitiva única. De las primeras coberturas que su solución no está constituida por una celda única (por ejemplo para cobertura $1/7$) la solución es una combinación de dos celdas primitivas que generan las soluciones para coberturas adyacentes. Esto puede conducir a una hipótesis simple: si se considera que de los casos $1/q$ sólo algunos de ellos son soluciones "elementales", que permiten construir la soluciones de casos más complicados. Sin embargo para las coberturas más pequeñas ocurre que las soluciones compuestas se componen a partir de la combinación no sólo de las adyacentes sino de las siguientes a éstas, por ejemplo: para cobertura $1/22$ la solución está formada de las celdas primitivas que son solución para coberturas $1/20$ y $1/24$.

Además existen soluciones más complejas, como es el caso de cobertura $1/27$ en donde la solución está compuesta por celdas primitivas de área 26 y 28, pero para cobertura $1/26$ la solución no está formada de una celda simple, sino que es la combinación de celdas de área 24 y 28. Y finalmente para la cobertura $1/18$ la configuración de energía mínima está formada por una celda de área 18 combinada con ella misma pero reflejada.

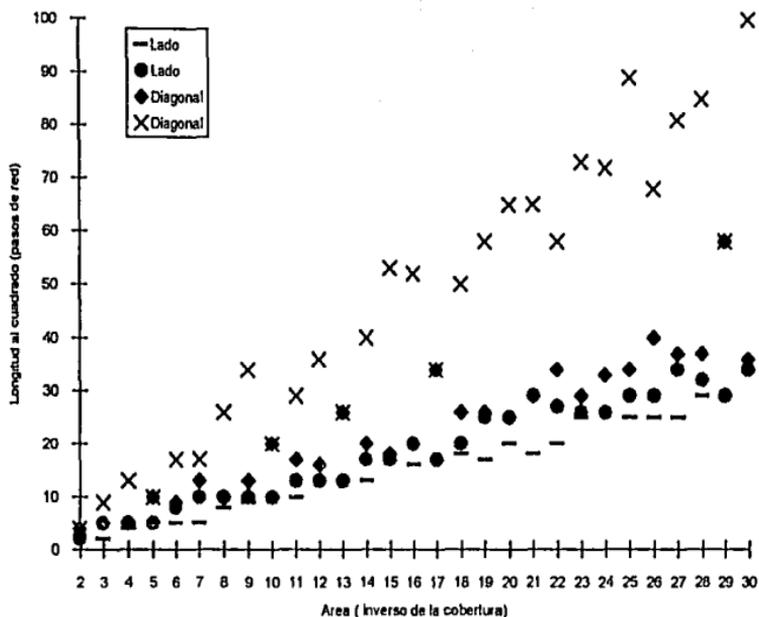
En la red triangular el comportamiento general es notablemente semejante existiendo alrededor de 20% de casos con soluciones compuestas por dos tipos

de celdas. También las soluciones compuestas con coberturas más altas están formadas a partir de celdas que participan en la solución de coberturas adyacentes, así para cobertura $1/5$ se combinan celdas de área 4 y 6 asociadas a las soluciones para las coberturas $1/4$ y $1/6$ y también al disminuir la cobertura las configuraciones se vuelven más complicadas, por ejemplo para $\theta = 1/23$ la solución está compuesta por celdas que son la solución de coberturas $1/21$ y $1/25$ y la solución para $\theta = 1/30$ es la combinación de una celda monoatómica y su reflejada.

IV. 3 La red cuadrada.

Con la finalidad de encontrar alguna indicación de cuales serán las coberturas de la forma $1/q$ para las cuales la solución no está compuesta por una celda única sino de la combinación de varias celdas se graficó (ver gráfica IV. 1.) el cuadrado de los lados y diagonales de la celda monoatómica de menor energía contra el inverso de la cobertura (que corresponde al área de la celda). Como puede verse en esta gráfica el comportamiento parece lineal para los cuadrados de los lados más cortos, sin que sea claro para que área ocurre una desviación del comportamiento lineal. Para el comportamiento de la diagonal más larga el comportamiento es más errático.

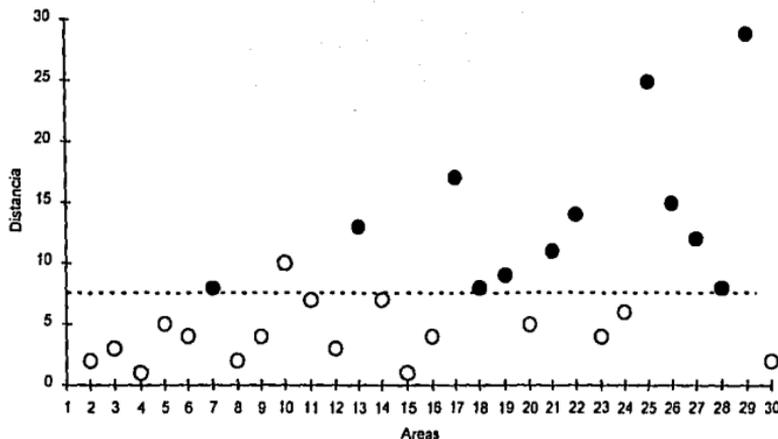
Un comportamiento interesante se puede observar al tomar el cuadrado de las primeras seis distancias más cortas entre dos adsorbatos en la red y restar la mínima de ellas de la máxima para las configuraciones obtenidas en [13] por Shinjo y Sasada. De ellas se han graficado con un círculo blanco las que se confir-



Gráfica IV. 1. El cuadrado de los lados y las diagonales contra el inverso de la cobertura.

maron en esta tesis y con un círculo negro las configuraciones para las cuales se encontró un ordenamiento que es combinación de dos celdas (ver gráfica IV. 2.). Para hacer esta comparación se tomó a la mayor de las primeras seis distancias al cuadrado y se le resto la menor de ellas con la idea de que la solución óptima, sin sustrato, es un hexágono para el que la diferencia de estas distancias es cero, porque en este caso los seis primeros vecinos están a la misma distancia. En el eje Y se graficó la diferencia de los cuadrados de las distancias y en eje X el inverso de la cobertura (área).

Si un punto está cerca del eje X, implica que esa configuración se "parece mucho" a la solución hexagonal sin sustrato, y los que estén alejados del eje X son configuraciones que no se parecen a la solución hexagonal.

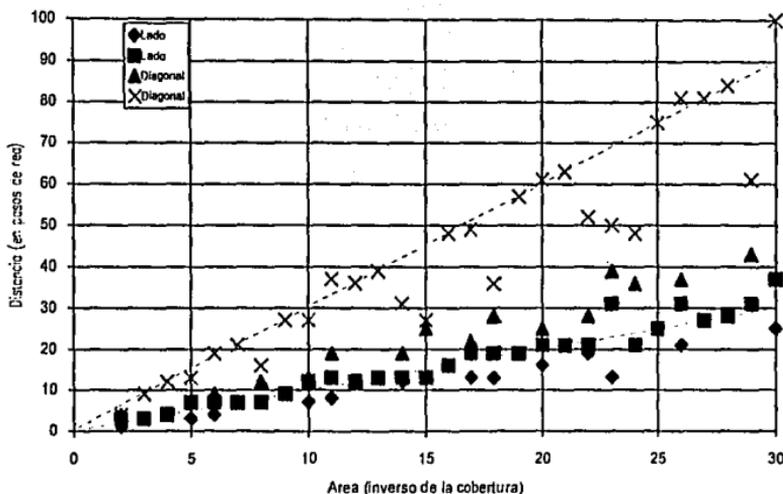


Gráfica IV. 2. Diferencias entre el mínimo y el máximo de los cuadrados de las primeras seis distancias en la red cuadrada para los ordenamientos reportados en [13].

En la gráfica se puede apreciar que la mayor parte de las configuraciones que tienen un valor cercano a la horizontal corresponden a configuraciones simples de las reportadas en [13] y que se confirmaron en esta tesis y para las que están alejados se encontraron configuraciones que combinan dos celdas. Se ha pintado una línea con la finalidad de hacer más claro este resultado.

IV. 4. La red triangular.

Se han construido las mismas gráficas que en caso de la red cuadrada, la primera de ellas tomando el cuadrado de las longitudes de las diagonales y los dos lados de las celdas primitivas contra el inverso de la cobertura para cada configuración (ver gráfica IV. 3.).



Gráfica IV. 3. Distancia al cuadrado de los lados y las diagonales de cada configuración contra el inverso de la cobertura.

En ella se puede notar que para ciertos valores del área hay puntos que siguen un comportamiento lineal, con una pendiente de tres y de uno. Estas configuraciones forman hexágonos exactos, por lo que los lados de la celda mínima y la diagonal más corta son iguales, y el cuadrado de la otra diagonal está completamente determinada al multiplicar por 3.

Estos hexágonos son posibles sólo para coberturas cuyo inverso sea de la forma siguiente:

$$\Lambda = L^2 + K^2 + L \cdot K$$

con K y L enteros así por ejemplo, para una cobertura de $1/9$, es decir, área de 9 se tiene que $9 = 0^2 + 3^2 + 0 \cdot 3$ entonces se puede formar un hexágono exacto de lado $\sqrt{3}$. Es fácil notar que ésta es la expresión para el cuadrado de la distancia del origen a la coordenada (K,L) en una red triangular. Entonces será posible

encontrar soluciones que formen un hexágono para coberturas cuyo inverso sea una distancia "natural" de la red triangular, es decir, que exista un punto en la red triangular para el cual el cuadrado de su distancia al origen sea igual al inverso del área.

Esto es posible en la red triangular porque todo segmento AB puede ser rotado 60° o 120° y seguir teniendo coordenadas enteras (ver fig. VI. 4.).

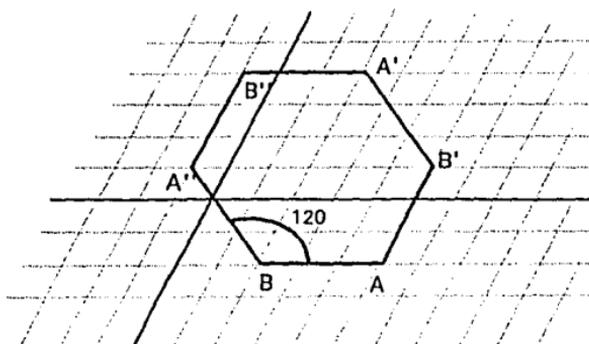


Figura IV. 1. Segmentos de rectas rotados 60° dentro de una red triangular.

En la figura se denota al punto generado por la rotación como B' y la distancia de B' a A es igual a la magnitud del segmento AB porque sólo se hizo una rotación. Este procedimiento se puede seguir para el segmento AB' y obtener el segmento B'A' que tendrá coordenadas enteras y formara un ángulo de 120° con AB', además la longitud de B' a A' será igual a la de B' a A. Al repetir este procedimiento por seis veces se asegura que se tendrá un hexágono con coordenadas enteras y uno de sus lados tiene la longitud del segmento AB. Y es posible demostrar que el área del hexágono es tres veces el cuadrado de la longitud del lado.

De aquí que para la red triangular existen soluciones hexagonales para las coberturas cuyo inverso es igual al cuadrado de una distancia natural en la red triangular, las primeras 8 coberturas que cumplen esta condición se presentan en la tabla IV. I.

Coordenada X	Coordenada Y	Distancia al cuadrado	Cobertura
0	1	1	1
1	1	3	1/3
0	2	4	1/4
1	2	7	1/7
2	2	12	1/12
0	3	9	1/9
1	3	13	1/13
2	3	19	1/19

Tabla IV. I. Coberturas para las que existe una solución exacta.

En la tabla IV. II se muestran los cuadrados de las distancias "naturales" de la red en orden creciente, para mostrar que hay algunos enteros que no son cuadrados de una distancia en la red triangular, por ejemplo para 2 y 5 no existen constantes K y L enteras que cumplan la siguiente relación:

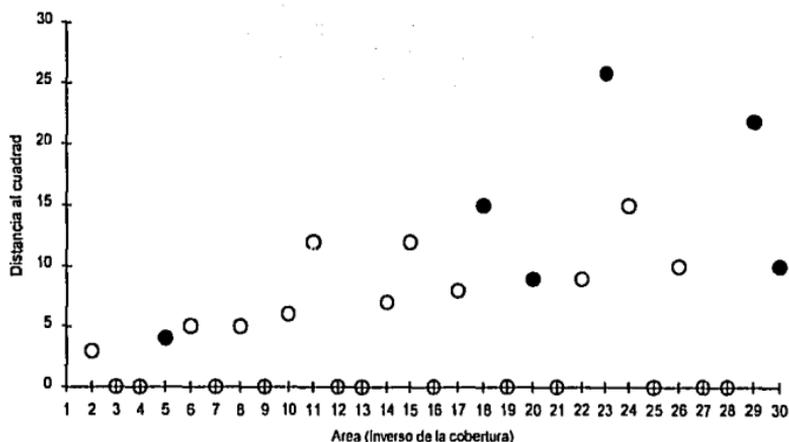
$$2 = L^2 + K^2 + L * K \text{ o } 5 = L^2 + K^2 + L * K$$

De aquí que habrá algunas coberturas para las cuales no será posible realizar una configuración hexagonal, y es en algunas de éstas donde existirán configuraciones compuestas.

Coordenada X	Coordenada Y	Distancia al Cuadrado	Cobertura
0	1	1	1
1	1	3	1/3
0	2	4	1/4
1	2	7	1/7
0	3	9	1/9
2	2	12	1/12
1	3	13	1/13
0	4	16	1/16

Tabla IV. 2. Coberturas para las que existe una solución exacta en orden respecto al cuadrado de la distancia.

Si se toman ahora los primeros seis vecinos para las configuraciones propuestas en [13] y se hace la diferencia entre el máximo y el mínimo de sus cuadrados (ver graf IV. 4.) se puede ver como para algunas áreas la diferencia es de cero. Este es el caso de las configuraciones descritas en el párrafo anterior (que forman hexágonos exactos), y sus seis primeros vecinos están todos a la misma distancia, como se muestra en la gráfica IV. 4.



Gráfica IV. 4. La diferencia de los cuadrados de las primeras seis distancias vs. el inverso de la cobertura.

En la gráfica se ha indicado nuevamente con un círculo lleno las coberturas para las que sus configuraciones no coinciden con los resultados obtenidos en esta tesis, y con un círculo blanco, las que si coinciden. En este caso el comportamiento es más difícil de explicar.

IV. 5. La degeneración de 1/6.

En el capítulo anterior se indicó la existencia de degeneración para las coberturas 1/6 y 1/7 (sección III. 2. A.) en red cuadrada y 1/5 y 1/6 para red triangular (sección III. 3. A) si se observan las configuraciones correspondientes (figura III. 2 c y figura III. 8 a) podrá notarse que en la configuración de un 1/7 para la red cuadrada una de las celdas que la forman es la celda primitiva de la configuración 1/6, y de la misma forma para la red triangular la configuración que corresponde a cobertura 1/5 también está formada de la celda primitiva para cobertura 1/6 en la red triangular. Lo cual sugiere que la propiedad geométrica

que provoca la degeneración corresponde a $1/6$ en cada una de las redes. Además en [14] se reporta que para la red rectangular centrada y cobertura $1/6$ también existe degeneración lo que induce a pensar que la degeneración es una propiedad de la cobertura $1/6$.

Para analizar esta situación se propone como primer paso el cálculo de la distancia entre dos partículas de una configuración generada por una celda simple. Si se ve al ordenamiento como filas de puntos, paralelas y equidistantes (ver figura IV. II)

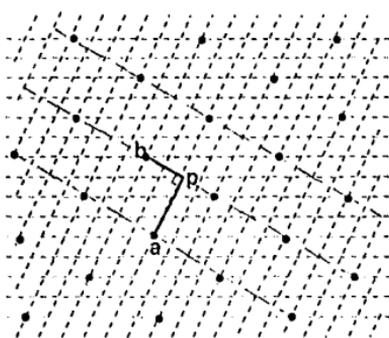
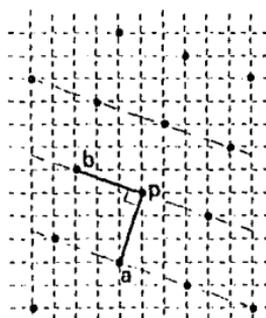
Cobertura $1/12$; $(0,6)$ $(2,2)$.

Figura IV. 2 Método para el cálculo de la distancia.

a) Cobertura $1/10$; $(0,10)$ y $(1,3)$.

la distancia entre partículas (por ejemplo a y b en la figura) puede descomponerse como dos segmentos que forman un ángulo recto. En la figura los desplazamientos son de a a p y de p a b y la distancia entre a y b estará dada por la suma de los cuadrados de la magnitud de cada uno de estos segmentos.

Este método es independiente de la red en que se aplique (en la figura se ha hecho para la red triangular y cuadrada), porque siempre será posible trazar las líneas paralelas y encontrar los segmentos correspondientes.

En el caso de las configuraciones para cobertura $1/6$ una de las líneas de partículas está compuesta por sitios que se ocupan de manera alternada y la diferencia entre las distintas configuraciones degeneradas consiste en que se ocupe uno u otro de tales sitios. En la figura IV. 3 se muestra esta configuración correspondiente a la red triangular, y en la cual esta línea es paralela al vector $(0,2)$.

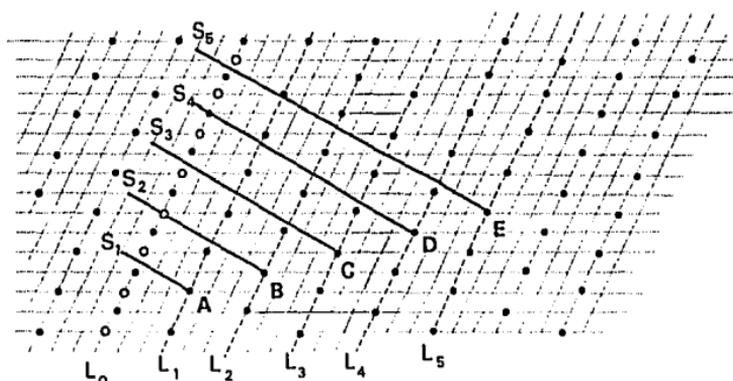


Figura IV. 3 Inserción de una macia en la red triangular.

Las posiciones de la configuración inicial se han marcado con círculos llenos y la posición alternativa con círculos vacíos. Para evaluar la diferencia energética entre ambos conjuntos de posiciones se ha trazado segmentos perpendiculares (marcados con la letra S) el primero a partir de el punto A que corresponde a S_1 , después a partir del punto B la línea S_2 y así sucesivamente.

La línea S_1 corta a la línea L_0 en un punto a partir del cual existe simetría de sitios llenos y vacíos, de manera que la contribución a la energía de las partículas de L_1 es exactamente igual si la interacción se lleva a cabo con partículas que están en los sitios marcados con círculos negros o en los sitios marcados con

círculos vacíos. Este es el hecho fundamental que explica que la degeneración se mantenga para cobertura 1/6 en arreglos localmente diferentes: El efecto de trasladar paralela a si misma una línea de partículas no afecta el valor de la energía entre dos líneas vecinas.

El segmento S_2 toca a la línea L_0 en un círculo vacío, por lo que para las partículas de la línea L_2 el valor de la energía es distinto si este sitio se encuentra ocupado o vacío. Aunque debe tomarse en cuenta que este sitio se encuentra considerablemente alejado. Al hacer el cálculo de la diferencia de energías entre los dos ordenamientos unas partículas contribuyen a la energía positivamente y las otras con el signo opuesto, por lo que la diferencia de energías disminuye al tomar en cuenta más partículas.

El cálculo para la contribución a la energía de las partículas en L_3 tiene las mismas características que para la partícula A. Para las de L_4 el cálculo es semejante al de la partícula B en L_2 pero con el signo opuesto. En general tenemos que para las líneas impares no hay diferencias en la energía y para las líneas pares se van alternando de signo. Esta contribución está dada para j el número de línea por la siguiente expresión:

$$\Delta E = (-1)^{j/2+1} \left\{ \frac{8}{(3j\sqrt{3})^3} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\left[\left(\frac{3j\sqrt{3}}{2} \right)^2 + n^2 \right]^{3/2}} \right\}$$

Al hacer el cálculo tiende asintóticamente a $6.2 \times 10^{-8} E_1$ para $j=2$ y para L_4 ($j=4$) el valor encontrado es: $0 \pm 1 \times 10^{-11} E_1$, de manera que la contribución dominante es la de L_2 .

Un análisis semejante se puede hacer para las redes cuadradas y rectangular centrada y es notable que la geometría esencial que gobierna el fenómeno sea invariante ante el cambio de sustrato. El dibujo para la red cuadrada se muestra en la figura IV. 4

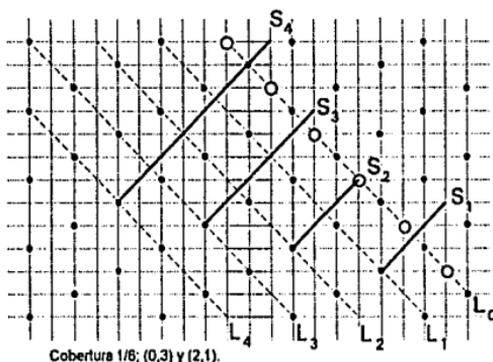


Figura IV. 4 Inserción de una macía en la red cuadrada.

Y el cálculo para la diferencia de energías para las líneas con j par está dado por:

$$\Delta E = (-1)^{j/2+1} \left\{ \frac{8}{(3j\sqrt{2})^3} + 2 \sum_{i=1}^n \frac{(-1)^i}{\left[\left(\frac{3j\sqrt{2}}{2} \right)^2 + i^2 \sqrt{2} \right]^{3/2}} \right\}$$

los valores asintóticos para L_2 y L_4 son: $5.06 \times 10^{-5} E_1$ y $-1 \times 10^{-9} E_1$ nuevamente es la contribución de L_2 la dominante.

Para ilustrar la situación correspondiente a la red rectangular centrada se hizo la figura IV. 5. y la fórmula de la diferencia de energías es:

$$\Delta E = (-1)^{j+1} \left\{ \frac{1}{(\sqrt{2}j)^3} + 2 \sum_{i=1}^n \frac{(-1)^i}{\left[2j^2 + i^2 \frac{\sqrt{2}}{3} \right]^{3/2}} \right\}$$

que tiende asintóticamente a los valores $3.8 \times 10^{-8} E_1$ y $0 \pm 7 \times 10^{-11} E_1$,

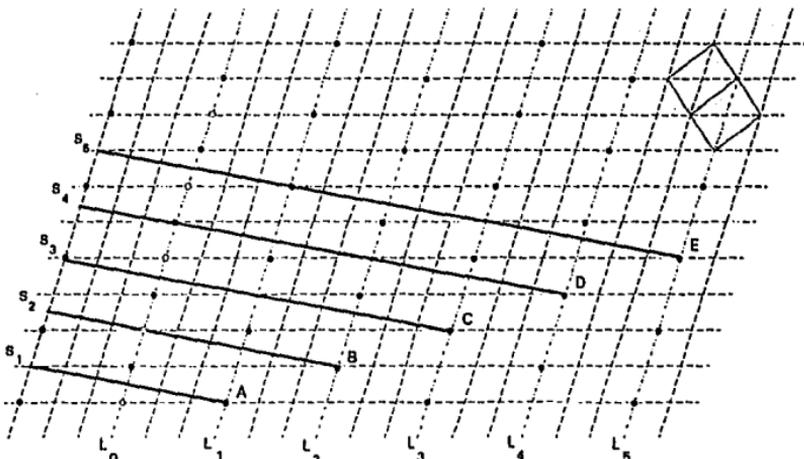


Figura IV. 5 Inserción de una macia en la red rectangular centrada.

IV. 6 La Conjetura de Cocho et al.

En el primer capítulo de esta tesis se hace referencia a la conjetura de Cocho et al. [10], que tal como se menciona en la sección IV. 2 consiste en un

procedimiento para construir las configuraciones de energía mínima para coberturas de la forma p/q a partir de las configuraciones de energía mínima $1/r$ inmediatamente inferior y superior a p/q . Para esta conjetura es esencial que los lados de las celdas de coberturas consecutivas tipo $1/r$ sean comunes.

Esta característica se cumple en la red cuadrada para las primeras coberturas y de acuerdo con [2] sólo existe una excepción para la cobertura $1/7$. Tal resultado sugiere que la conjetura se podría modificar, utilizando las coberturas $1/r$ que están formadas por celdas simples y el resto estarán formadas por combinaciones de estas, en el caso de $1/7$ en la red cuadrada se construye con las celdas de $1/6$ y $1/8$. Por todo lo anterior es importante tabular los valores de los lados de las celdas para cada una de las coberturas que tienen solución con celdas monoatómicas (o simples) y verificar si siempre hay lados comunes en coberturas consecutivas. Para la red cuadrada estos resultados se reportan en la tabla IV. 3.

Tabla IV. 3 Longitudes de los lados y las diagonales de las celdas mínimas para red cuadrada

d/r	2	3	4	5	6	8	9	10	11	12	14	15	16	18	20	23	24	25	28	29	30
1	2	2	4	5	5	8	9	10	10	13	13	17	18	18	20	25	26	25	29	29	34
2	2	5	5	5	8	10	10	10	13	13	17	17	20	20	25	26	26	29	32	29	34
3	4	5	5	10	9	10	13	20	17	16	20	18	20	26	25	29	33	34	37	58	36
□	4	9	13	10	17	26	34	20	29	36	40	53	52	50	65	73	72	89	85	58	100

Como puede verse existen fronteras en las que no hay lados comunes como entre 15 y 16 y entre 24 y 25. (separadas con una línea más gruesa en la tabla). Para la red triangular este efecto es más frecuente y hay una cantidad mayor de fronteras, por ejemplo para las coberturas $1/3$ y $1/4$ no hay lados comunes.

	2	3	4	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	19	21	22	24	25	25	27	28	30
1	1	3	4	4	7	7	9	7	8	12	13	12	13	16	13	19	21	19	21	25	21	27	28	25
2	3	3	4	7	7	7	9	12	13	12	13	13	13	16	19	19	21	21	21	25	31	27	28	37
3	4	3	4	9	7	12	9	13	19	12	13	19	25	16	22	19	21	28	36	25	37	27	28	37
4	4	9	12	1	21	16	27	27	37	36	39	31	27	48	49	57	63	52	48	75	81	81	84	100

A pesar del hecho anterior es notable que la mayoría de los casos $2/q$ estudiados para la red cuadrada y triangular concuerdan con la conjetura de Cocho et. al.

Para el caso de coberturas $2/q$ y red cuadrada la conjetura de Cocho et al. se cumple cuando q toma los valores de 5,7,11, 13, 15 y 17,.

En todas las mallas con celda simple, siempre es posible escoger dos tipos de celdas, por ejemplo para la cobertura $1/3$ se puede tener el paralelogramo de coordenadas $(-1,1)$ y $(1,2)$ y también el formado por $(-1,1)$ y $(2,1)$ ver fig. IV. 6.

Los resultados para cobertura $2/5$ y $2/7$ están formados por combinación de las celdas que corresponden a las configuraciones de energía mínima para coberturas $1/2$ $1/3$ y $1/4$, sólo que en $2/5$ se utiliza uno de los paralelogramos posibles y en $2/7$ el mismo sólo que con una descripción diferente (ver fig. III. 11).

Para poder distinguir entre cual de los paralelogramos usar podemos aplicar el criterio del mínimo semiperímetro, es decir, se suman los 2 lados distintos del paralelogramo y la menor de sus diagonales, y el paralelogramo con una suma menor es el que se utiliza para construir la combinación. en el ejemplo anterior, para el primer paralelogramo se tiene $\sqrt{2} + 2\sqrt{3}$ y para el segundo $\sqrt{2} + \sqrt{3} + 3$, así que se debe tomar el primero de ellos.

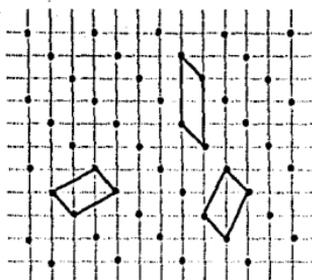


Figura IV. 6 Distintos tipos de celdas sobre la misma configuración.

Para la cobertura $2/9$ se forma una estrella combinando los paralelogramos de las configuraciones de energía mínima para coberturas $1/4$ y $1/5$. Pero no en el orden que propone la conjetura de Cocho et al. sino que están recorridas una respecto a la otra y no se forman bandas de una sola celda sino de dos.

Las configuraciones para coberturas $2/13$ y $2/15$ están formadas por paralelogramos de área 6 y 8, esto se debe a que para área 7 no existe una celda unitaria. Entonces se sigue la siguiente secuencia, para $2/13$ hay tres paralelogramos de área 6 y uno de área 8, y para $2/15$ tres de área 8 y uno de área 6. Esta distribución no es posible de obtener estrictamente a partir de la forma que propone Cocho et al. porque en la solución para una dimensión aparecen todas las distancias enteras y para el caso bidimensional no aparece la celda que corresponde a cobertura $1/7$.

En el caso de la red triangular encontramos que es posible aplicar la conjetura de Cocho et al. (aunque esta sólo fue propuesta para redes cuadradas) para coberturas $2/5$, $2/7$ y $2/13$ y $2/17$.

Nuevamente aparece una configuración de estrella para cobertura $2/15$ formado por celdas de áreas 7 y 8 que corresponden a configuraciones de energía mínima.

Para coberturas $2/9$ y $2/11$ no aparece una celda de área 5, sino que nuevamente se combinan celdas de área 4 y 6. Sólo que aparecen formando tiras o mosaicos separados.

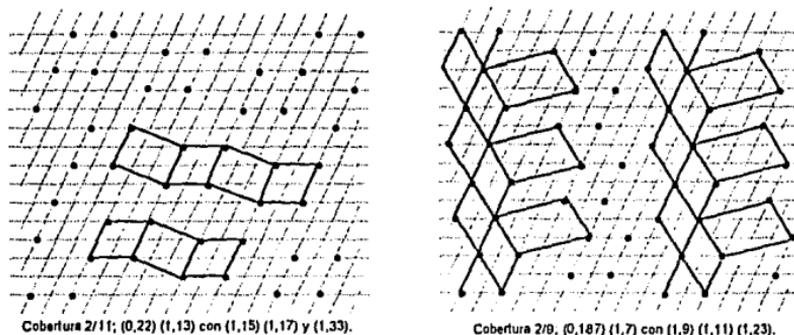


Fig VI. 8 Raras combinaciones de celdas de área 4 y 6 para coberturas $2/11$ y $2/9$.

En la figura se muestra como para cobertura $2/9$ aparecen no sólo las celdas de área 4 y 6 sino que aparece una celda de área 6 distinta y forman una especie de mosaicos separados por figuras que no son paralelogramos. Y para $2/11$ también se forman tiras de celdas de área 6 y 4 pero separadas por paralelogramos distintos a los de las configuraciones de energía mínima.

Las configuraciones con tantos tipos de celdas pueden ser ocasionadas porque la búsqueda sólo se realizó para dos veces el área. Una nueva búsqueda para tres y cuatro veces el área podría reportar otras configuraciones más ordenadas y con sólo dos tipos de celdas.

Al parecer si existen ciertas celdas de mínima energía que conforman al resto de las configuraciones, pero la forma de combinarse y de seleccionar las celdas que se utilizan para cada cobertura aún no es clara.

Capítulo V

Conclusiones

*"Minino de Cheshire", comenzó
ella algo tímidamente... "Me
dirías por favor, ¿Qué camino
debo de tomar para irme de
aquí?"*

*"Eso depende mucho de dónde
quieras ir", dijo el gato*

*"Poco me preocupa donde ir"
contestó Alicia*

*"Entonces nada importa que
camino tomes", replicó el gato.*

Lewis Carroll

El objetivo de este trabajo fue encontrar las configuraciones de energía mínima de partículas que interactúan dipolarmente y se encuentran en los nodos de redes cuadradas y triangulares. El método de solución fue la "búsqueda exhaustiva" [2], y en particular se desarrolló para este procedimiento un algoritmo más potente que el antes utilizado con las siguientes características:

- a) Genera una lista completa de las configuraciones posibles y distintas entre sí en lugar de sólo encontrar la de energía menor.

- b) La búsqueda se realiza en un número menor de casos gracias a la descripción que se ha hecho de las configuraciones (capítulo II).
- c) La implementación se llevó a cabo en lenguaje C, aumentando la eficiencia y transportabilidad entre distintos sistemas de cómputo.

El interés en la solución de este modelo surge de considerar la adsorción sobre superficies metálicas de átomos alcalinos, que es a la vez una situación que aparece en ciertos procesos catalíticos. Estos procesos se tratan brevemente en el capítulo I. También en este capítulo se muestra que otros autores han tratado este problema [9] [10] [13]; ellos esperaban que el comportamiento de las celdas primitivas que generan las configuraciones de adsorbatos de energía mínima tuvieran forma romboidal y base monoatómica; en general se esperaba que el área de las celdas solución fuese el inverso de la cobertura. Sin embargo se puede ver del amplio reporte presentado en el capítulo III, que existe un número considerable de celdas complejas con bases diatómicas. Esta es una de las principales conclusiones de los resultados antes descritos: el comportamiento de las soluciones es notoriamente más complejo que lo esperado por otros autores [9] [10] [13].

Sin embargo puede adelantarse como una hipótesis de trabajo que las configuraciones que más se alejan de una configuración tipo hexagonal son las que se romperán en una estructura compleja como puede verse en la gráfica IV. 2. para red cuadrada; en la red triangular se puede describir de forma analítica las soluciones exactamente hexagonales.

Otra de las conclusiones interesantes es que mediante el mismo algoritmo se obtiene con claridad las configuraciones degeneradas. Propiedad que es consecuencia de la geometría típica de la cobertura $1/6$ (como se mostró en la

sección IV. 5) y que está presente en las tres redes estudiadas, característica que debe tener una explicación más profunda y que aún no se ha encontrado.

Finalmente con respecto a la conjetura de Cocho y coautores [10] concluimos que la hipótesis sobre la que está construida, a saber, que las coberturas consecutivas tienen lados comunes es falsa. Sin embargo la gran mayoría de las configuraciones generadas para coberturas $2/q$ y las que corresponden a coberturas $1/q$ pero que están formadas por dos celdas distintas se ajustan a la conjetura, por lo tanto resulta sugestivo pensar que la conjetura puede ser ampliada para incorporar los nuevos casos que aparecen. La validez de esta conjetura ampliada estaría sustentada en que la idea general propuesta por Cocho y coautores para este problema sigue siendo válida, esto es, las configuraciones se forman de tiras de celdas de energía mínima

Una vez probada y explorada la velocidad del nuevo algoritmo desarrollado es posible plantearse numerosas tareas, como: a) estudiar el caso en que el sustrato tiene sitios con distintas energías de enlace, b) otros tipos de redes y c) Calcular la aportación de las partes del ordenamiento que se encuentran al infinito.

Estos proyectos son accesibles a los recursos de cómputo actuales y pueden ser desarrollados como continuación de este trabajo.

Referencias

- [1] *Catalizadores ¿La piedra filosofal del siglo XX?*; Sergio Fuentes y Gabriela Díaz, Fondo de Cultura Económica; La ciencia desde México, 1988; p 93.
- [2] H. Arce, L Mochán y G. Cocho, Surf. Sci. 294, (1933) 108.
- [3] *Física General Mecánica y Física molecular*, L. Landau y A. Ajezaer, MIR Moscú, 1979, p 397 .
- [4] Surface Physics, Pruton , Oxford Physics Series 1987.
- [5] *Fisicoquímica*, Gilbert W. Castellan, Fondo Educativo Interamericano, S. A. , 1971, p 835 .
- [6] *Introduction Solid State Physics*, P. G. Kittel , Wiley, 6ª Ed. , New York 1986 p 11.
- [7] Tilings and Patterns, B. Grumbaun, University of Washington 1987.
- [8] V.L. Pokrovsky y G.V. Ulmin, J. Phys. C 11 (1978) 3535.
- [9] J. Hubbard, Phys. Rev. B 17 (1978) 494.
- [10] G. Cocho, R. Pérez-Pascual y J.L. Ruis, Europhys. Lett. 2 (1986) 493.
- [11] K. Muller, E. Lang, H. Endress y K. Heinz, Appl. Surf Sci. 1112 (1982) 625.
- [12] K. Heinz, G. Besold y K. Muller, *Phycis of Solid Surface* 1987 p. 191, Eisevier 1987.
- [13] K. Shinjo y T. Sasada, J. Phys. Soc. Jpn. 52 (1985) 1469.
- [14] H. Arce, Tesis Doctoral Facultad de Ciencias UNAM 1990.
- [15] *Data Structures, Algorithms, and Performance*, D. Wood, Addison Wesley, New York 1993, p 5.

-
- [16] Manual de Matemáticas, I. Bronshtein y K. Semnchaev, MIR Moscú 1977, p 189.
- [17] L.D. Roelofs y D. L. Kriebel, J. Phys. C:Solid State 20 (1987) 2937.