



Exploración de la superficie de energía potencial vía el algoritmo de búsqueda *Cucú*

José Luis Cabellos¹, Peter Rodríguez¹, Filiberto Ortiz-Chi² y Gabriel Merino¹

¹ Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y Estudios Avanzados, Unidad Mérida, Km. 6 Antigua carretera a Progreso Apdo. Postal 73, Cordemex, 97310, Mérida, Yuc., México.

² Cátedra CONACYT, División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, C.P. 86690, Cunduacán, Tabasco, México.

e-mail: jose.cabellos@cinvestav.mx, gmerino@cinvestav.mx

El problema de encontrar la estructura de mínima energía en diversas áreas como Química, Física y Biología ha motivado el desarrollo o adaptación de diversos algoritmos para resolver este problema. En este trabajo se ha adoptado el algoritmo metaheurístico *Cucú* para explorar las superficies de energía potencial de cúmulos y moléculas de forma eficiente. El algoritmo de búsqueda *Cucú* ha sido desarrollado por Yang y Deb¹ y pertenece a la clase de algoritmos inspirados en la naturaleza que imita el parasitismo obligado de las crías del pájaro *Cucú*. El código *Cucú* se desarrolló en *Python* y se acopló a diversos códigos de estructura electrónica. Se presenta la metodología y los resultados para cúmulos atómicos de Boro.

[1] Yang XS.; Deb S. Cuckoo search via Lévy flights. Proceedings of world congress on nature & biological inspired computing (NaBIC 2009 India). USA: IEEE Publications, 2009. p 210-4.