



BUSQUEDA DE MINIMOS GLOBALES EN SISTEMAS MOLECULARES MEDIANTE UN ALGORITMO DE RECOCIDO SIMULADO

Ignacio Migliaro¹, J. Oscar C. Jimenez-Halla¹, Filiberto Ortiz-Chi², José Luis Cabellos³ y Gabriel Merino³

¹Departamento de Química (DCNE), Universidad de Guanajuato, Noria Alta s/n, 36050, Guanajuato, Guanajuato, México.

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

³Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida. km 6 Antigua Carretera a Progreso. Apdo. Postal 73, Cordemex, 97310, Mérida, Yuc., Mexico. E-mail: jose.cabellos@cinvestav.mx, gmerino@mda.cinvestav.mx

El problema de encontrar la configuración geométrica de la energía más baja para sistemas moleculares ha atraído una importante atención y muchos métodos para resolver estos problemas han sido presentados y estudiados en áreas de física, química y biología. En este trabajo proponemos la implementación en *Python* del algoritmo de recocido simulado acoplado a programa de estructura electrónica *Gaussian*. El código explora la superficie de energía potencial en la búsqueda del mínimo global de sistemas moleculares compuestos hasta por diez átomos. Introducido en 1982 por Kirkpatrick¹, el método del recocido simulado hace alusión a la mecánica estadística del recocido de los sólidos. Se presenta el análisis de los parámetros de control, método y tasa de enfriamiento para la convergencia del algoritmo así como los resultados de las optimizaciones para moléculas de B_n (n=3-10), lineales, trigonales y tetraédricas.

1. S. Kirkpatrick, *Science* **1983**, 220, 671-680.