

3. OBJETIVOS

Los objetivos del presente trabajo se resumen en los siguientes puntos:

1. Llevar a cabo la optimización de estructuras de Lennard-Jones (obtenidas en otro trabajo) con el potencial de Morse a diferentes valores del intervalo de interacción. De esta manera se tendrá una idea preliminar del comportamiento de la superficie de energía potencial de los agregados en función de este parámetro.
2. Llevar a cabo exploraciones de la superficie de energía potencial para agregados de gases nobles -argón- de 6 a 12 miembros, utilizando el método de búsqueda estocástica de M. Saunders acoplado al potencial de Morse.
3. Determinar cómo el intervalo de interacción afecta la SEP de los agregados, llevando a cabo el proceso de búsqueda estocástica para diferentes valores de ρ_0 -de 1 a 10-. A partir de este proceso los valores de los parámetros utilizados en el potencial son generalizados para gases nobles, pero teniendo la posibilidad de utilizar valores específicos de cada gas noble [45]. Los resultados obtenidos pueden extenderse también a agregados de otros tipos, como por ejemplo agregados de átomos metálicos.
4. Comparar los resultados de las búsquedas hechas con el potencial de Morse de manera cualitativa, con los resultados obtenidos en estudios reportados de la exploración de SEP de argón utilizando el potencial de Lennard-Jones [50].
5. Análizar los resultados, y obtener las conclusiones correspondientes.