



DETERMINACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE CÚMULOS DE PALADIO

Roberto O. Torres Coutiño¹, Juan A. Reyes-Nava¹

¹Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Energías Renovables; Instituto de Ciencias Básicas y Aplicadas; Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas; Tuxtla Gutierrez, Chiapas, México
ser.nyhed@gmail.com

Se hace un estudio de la estructura y la termodinámica de cúmulos de paladio de 55 y 147 átomos usando Dinámica Molecular. Las interacciones entre los átomos del cúmulo son modeladas con el Potencial de Gupta. Las curvas calóricas y las capacidades caloríficas de los ensambles correspondientes a cada cúmulo se determinan con el método del multihistograma. Las estructuras de las fases sólidas se extraen del templado de 100 cúmulos. Del mismo templado, fueron colectadas muestras de microestados de varios estados de equilibrio termodinámico del ensamble. Además, para encontrar las estructuras de la fase líquida se enfrían rápidamente 2000 cúmulos.

Los resultados del ensamble de cúmulos de 55 átomos muestran estructuras de fase sólida en su mayoría icosaédricas perfectas, en algunos casos con deformaciones. Además, se encontró que la temperatura de fusión este ensamble es de 615 K. Se encontró también que entre las cohesiones de las estructuras de la fase sólida y las de las estructuras de la fase líquida hay una diferencia de aproximadamente 25 meV/átomo. Por otra parte, un ensamble de cúmulos de Na₅₅ tiene una temperatura de fusión de 166 K [1] y una diferencia entre las cohesiones de las estructuras inherentes a la fase sólida y líquida del cúmulo de aproximadamente 7.5 meV/átomo [2]. Comparando las propiedades de ambos ensambles se concluye que cuanto mayor es la diferencia de cohesión entre las estructuras de equilibrio mecánico del cúmulo (inherentes a las fases líquida y sólida) mayor será la temperatura de fusión del ensamble.

¹Reyes Nava, J. A.; Garzón, I. L.; Beltrán, M. L.; Michaelian, K. *Rev. Mex. Fís.* **2002** 48 450-456

²Reyes Nava, J. A.; Garzón, I. L.; Michaelian, K. *Phys. Rev. B* **2003** 67 165401