



## ESTUDIO DE TRANSICIONES DE FASE EN CÚMULOS DE Ga

Isaac L. Huidobro-Meezs<sup>1</sup>, Omar López-Estrada<sup>1</sup>, Emilio Orgaz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria, CP 04510, México, D.F. México  
ishume94@gmail.com

A través de medidas de la capacidad calorífica se han reportado las temperaturas de fusión de una gran variedad de cúmulos de Ga [1]. Casi todos los casos reportados presentan un sólo pico en la capacidad calorífica por lo que pueden ser explicados por un modelo de dos estados donde la transición es descrita mediante un equilibrio sólido-líquido. Sin embargo, es de particular interés el estudio del Ga ya que en algunos cúmulos se observan dos transiciones de fase en donde una de ellas es atribuida a una transición estructural sólido-sólido. Previamente se ha mostrado que el uso de dinámicas moleculares Born-Oppenheimer reproduce satisfactoriamente las curvas de capacidad calorífica en sistemas finitos [2]. En este trabajo reportamos la capacidad calorífica en cúmulos de Ga<sub>13</sub> por medio de dinámicas moleculares Born-Oppenheimer con polarización de espín. El análisis estructural empleando variables colectivas permitió caracterizar la aparición de transiciones de fase, complementando la investigación de la capacidad calorífica.

[1] Breaux, G. A.; Hillman, D. A.; et al, J. Am. Chem. Soc. 126(28), 8628–8629 (2004)

[2] Vásquez-Pérez, J. M.; Calaminici, P.; Köster, A. M., Comp. Theor. Chem., 1021, 229–232 (2013)