



ESTUDIO TERMODINAMICO Y ESTRUCTURAL MEDIANTE DINÁMICA MOLECULAR BORN-OPPENHEIMER DEL CÚMULO Al_{37}^+

Gabriela Fundora-Galano¹, Omar López-Estrada¹, Emilio Orgaz¹

¹Facultad de Química, Departamenteo de Física y Química Teórica, Universidad Nacional Autónoma de México; México DF 04510, México
e-mail: Gabriela.fundora@gmail.com

Las nanopartículas o cúmulos metálicos han atraído la atención de la comunidad científica en las últimas décadas. Esto se debe a que muchas de las propiedades de estos materiales difieren sustancialmente de las de los sistemas macroscópicos. Por ejemplo, se ha observado dependencia con el tamaño en propiedades usualmente extrínsecas como la capacidad calorífica o el punto de fusión. El estudio de dichas propiedades es esencial para la síntesis y aplicación de dichos materiales. Un caso de estudio son los cúmulos de aluminio, en los cuales se ha observado que variaciones de tamaño de hasta un átomo pueden provocar cambios en la temperatura de fusión de cientos de grados.

En este trabajo se utilizaron dinámicas Born-Oppenheimer para estimar el punto de fusión del cúmulo de Al_{37}^+ y explicar la anomalía en la capacidad calorífica. Para ello se investigó la dependencia con la temperatura de la capacidad calorífica aunado a descriptores estructurales. Un pico en la curva de capacidad calorífica en función de la temperatura, debido al calor latente, indica la transición de fase. Los resultados que obtuvimos fueron comparados con los datos experimentales disponibles¹ y se obtuvo una buena concordancia. Un aumento en la distancia al centro de masas, el radio de giro y el volumen son evidencia de la transición. Se estudiaron la dinámica de varias geometrías y se analizaron las contribuciones de diferentes multiplicidades de espín al promedio termodinámico.

Referencias:

¹Aguado, A.; Jarrold, M. F. *Annual Review of Physical Chemistry Annu. Rev. Phys. Chem.* **2011**, *62* (1), 151–172.