



La Transición Estructural de los Cúmulos Na₃₀₉

Juan A. Reyes-Nava¹, Oscar Olvera-Neria², Ignacio L. Garzón³,
Joel Moreira¹, Joel Pantoja¹, Guillermo R. Ibáñez¹

¹Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Energías Renovables,
Instituto de Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas; México

²Departamento de Ciencias Básicas,

Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco; México

³Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México; México

e-mail: andres.reyes@unicach.mx

Se proporcionan consideraciones teóricas que contribuyen a la comprensión del porqué los cambios estructurales de un ensamble de cúmulos Na₃₀₉ detectados por mediciones foto-electrónicas no inducen ninguna señal en su calor específico experimental. El templado de una colección de estos cúmulos, modelando sus interacciones atómicas con el potencial de Gupta, revela que en efecto Na₃₀₉ tiene dos configuraciones de acentuada estabilidad. La más estable es una estructura icosaédrica perfecta (configuración ico), tal como es demostrado por experimentos. La configuración candidata, extraída del modelo, para la estructura desconocida es una variación hcp de la primera (configuración ico-hcp). Posee más átomos con baja coordinación, pero también más átomos con alta coordinación. Puesto que la diferencia entre las cantidades de los primeros es mayor que la diferencia entre las cantidades de los segundos, el cúmulo pierde un poco de cohesión. Por otra parte, se determinan las propiedades de un ensamble de estos cúmulos en equilibrio termodinámico. La comparación entre resultados teóricos y experimentales muestra que el modelo solo reproduce la transición sólido-sólido. Sin embargo, sus predicciones para la fusión y la pre-fusión son incorrectas. Sugerimos que ambas fallas podrían ser consecuencias de únicamente una falla elemental: la subestimación de la cohesión de átomos con baja coordinación. Esta fuente de error del modelo no afectaría la descripción de la transición estructural, puesto que esta transformación es provocada esencialmente por cúmulos compuestos de átomos con alta coordinación. A pesar de sus fallas, el modelo permite determinar por vez primera una estructura candidata para la fase sólida desconocida de estos cúmulos. Esta estructura, al igual que la falla elemental sugerida para el modelo, deberán confirmarse por cálculos ab-initio.

References

Haberland, H.; Hippler, T.; Donges, J.; Kostko O.; Schmidt M.; von Issendorff B.
Melting of Sodium Clusters: Where Do the Magic Numbers Come From?.
Phys. Rev. Lett. **2005**, 94, 035701.