



## PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE AGREGADOS BINARIOS Ag-Ni

Emilio Orgaz<sup>1</sup>, Sarai López-Olay<sup>1</sup>, Omar López-Estrada<sup>1,2</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.

<sup>2</sup>Physics Department, King's College London. WC2R 2SL, London, UK.

Descubrir como dependen las propiedades físicas y químicas de las nanopartículas con respecto a sus formas estructurales y su estequiometría es un tema intrigante de la ciencia. El estudio de agregados binarios en fase gas y su detección ha permitido conocer el comportamiento magnético de dichos agregados. Previamente se ha reportado la dependencia de la estabilidad estructural y magnética para pequeños agregados binarios con respecto al dopaje[1]. En este trabajo por medio de simulaciones de dinámica molecular Born-Oppenheimer, hemos estudiado el efecto del dopaje (Ni) en cúmulos de Ag de 19 átomos. Un análisis de comunes vecinos y de capas[2] nos ha permitido elucidar la formación de dichos cúmulos durante la simulación. Como conclusión hemos observado una sistemática estabilidad estructural y magnética cuando las impurezas se trasladan al centro del cúmulo.

[1]Di Paola, C. and Baletto, F. The european Physical Journal D 67:49 (2013).

[2] L. Pavan, K. Rossi, F. Baletto, The Journal of Chemical Physics 143(18), 184304 (2015).