REPORTE

1. Estudio de la formación de nanopartículas bimetálicas con propiedades magnéticas específicas.

2. El desarrollo de la nanociencia y la nanotecnología han ido en incremento durante las últimas dos décadas. Un ejemplo claro ha sido la atención que se ha puesto en el estudio de cúmulos o agregados de unos pocos átomos debido a su importancia en la física, la química y la ciencia de los materiales.

La investigación de las estructuras electrónicas de cúmulos de metales de transición es un ejemplo de dicho incremento, principalmente debido al potencial tecnológico que pueden llegar a tener. En el caso de este proyecto, nano-partículas de níquel, aluminio y cromo han sido previamente investigadas debido a sus cualidades como catalizadores, además de sus propiedades magnéticas. No obstante los continuos esfuerzos por encontrar las características fundamentales, la determinación de las geometrías del estado fundamental de los cúmulos en general sigue siendo un problema difícil de resolver debido a la cantidad numerosa de isómeros que pueden existir en la *superficie de energía potencial*. En lo que va de 2016 y será el caso en 2017, el estudio ahora de sistemas bimetálicos será el tema central. Los detalles temáticos se describen mas adelante.

3. Breve descripción de avances.

Los estudios previos han dado lugar a tres publicaciones internacionales indexadas y tres trabajos en redacción. En estos estudios publicados se da agradecimiento explícito a la DGTIC por los servicios de supercómputo.

Durante 2016 me he beneficiado con la inclusión de nuevos estudiantes en el proyecto. El ingreso de estos nuevos estudiantes tiene la ventaja enorme de haber extendido las perspectivas originales.

Debo mencionar también la obtención del grado del ahora Dr. Omar López-Estrada quien iniciará una estancia post-doctoral en noviembre de 2017. El Dr López-Estrada sigue colaborando en el proyecto de manera fundamental con un compromiso y dedicación no menor al que ya mostró durante la realización de sus tesis.

4. Cálculos realizados.

En todos los estudios realizamos cálculos de la estructura electrónica a diferentes niveles de aproximación. Aunado a ellos, en casos especiales, realizamos dinámicas moleculares ab initio.

5. Software utilizado.

Los códigos usualmente empleados son:

CODIGO	METODOLOGIA	PARALELISMO
Wien2k	LAPW	moderado
Quantum Espresso	DFT-pseudopots	alto
VASP	DFT-pseudopots	alto
Gaussian	Métodos moleculares	bajo
deMon2k	Métodos Moleculares ADFT	alto

6. Recursos utilizados.

7. Lista de colaboradores.

1) EUNICE SARAI MORALES LOPEZ-OLAY (estudiante licenciatura)
2) GABRIELA FUNDORA GALANO (estudiante licenciatura)
3) ISAAC LEONARDO HUIDOBRO MEEZS (estudiante licenciatura)
4) JOSE MARIA CASTILLO ROBLES (estudiante licenciatura)
5) Q. ITZEL PEREZ TREJO (estudiante maestría)
6) Dr. OMAR LOPEZ ESTRADA

8. Lista de artículos publicados.

Los trabajos publicados (copias en anexo) en estos dos años son:

- Omar López-Estrada, Sarai López-Olay, Andrea Aburto and Emilio Orgaz
  Unexpected High Spin Polarization in Cr4 Cluster
  J. Phys. Chem. C, 120, 23892-23897 (2016)

- Omar López-Estrada and Emilio Orgaz
  Theoretical Study of the Spin Competition in Small-Sized Al Clusters
  J. Phys. Chem A 119, 11941 (2015)

- Omar López-Estrada and Emilio Orgaz
  Transition states, structural and magnetic properties of small-sized nickel clusters

Phys. Rev. B 91 075428 (2015)

9. Lista de alumnos graduados.

Dr. OMAR LOPEZ ESTRADA (doctorado 2016)

Q. ITZEL PEREZ TREJO (licenciatura fuera de este proyecto)

Tesis de licenciatura (examen de grado en 2017)

EUNICE SARAI MORALES LOPEZ-OLAY

GABRIELA FUNDORA GALANO

ISAAC LEONARDO HUIDOBRO MEEZS

JOSE MARIA CASTILLO ROBLES

10. Lista de congresos nacionales e internacionales y participantes.

Decimoquinta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Mérida, Yucatan, 17 al 19 de noviembre 2016.

- Isaac Huidobro Meezs, Omar López-Estrada, Emilio Orgaz

  Estudio de transiciones de fase en cúmulos de Ga"

- José María Castillo Robles, Omar López–Estrada, Emilio Orgaz

  Propiedades ópticas de nanopartículas metálicas soportadas en superficies de TiO2

- Emilio Orgaz, Sarai López-Olay,Omar López–Estrada

  Propiedades magnéticas de agregados binarios Ag-Ni

- Omar López–Estrada, Emilio Orgaz, Francesca Baletto

  Transformaciones estructurales en cúmulos metálicos

- Gabriela Fundora-Galano, Omar López Estrada, Emilio Orgaz

Estudio termodinámico y estructural mediante dinámica molecular Born-Oppenheimer del cúmulo Al37+