

# Seminario de Estudiantes 2023-A

Invita a la plática

## Transición de fase magnética y dinámica de red en función de la presión en FeGe: un estudio de primeros principios

Presenta

**M.C. Raúl Alfonso Tonacatl Monez**

Instituto de Física "Ing. Luis Rivera Terrazas" (BUAP)

Se presenta un estudio de la evolución de las propiedades estructurales, electrónicas y dinámica de red en el compuesto FeGe, con estructura B20 no-centrosimétrica, en función de la presión, para dos fases magnéticas: no-magnética (NM) y ferromagnética (FM). Se han realizado cálculos de primeros principios mediante la teoría del funcional de la densidad (DFT), usando el método de pseudopotenciales con bases mezcladas (MBPP) y la teoría perturbativa del funcional de la densidad (DFPT). Se analizan las propiedades estructurales para obtener la ecuación de estado p-V de cada sistema (NM y FM) y poder calcular la presión de transición de fase magnética. Para diferentes valores de presión, se calculan la densidad de estados y estructura de bandas, obteniendo una contribución mayoritaria de los estados Fe(d), mientras que la contribución minoritaria de los estados Ge(s) y Ge(d) cambia a medida de la presión aumenta, pero solo para uno de los canales de espín. Al tomar en cuenta el magnetismo se tiene una notable reducción en la energía de los modos fonónicos acústicos del punto de alta simetría R. Finalmente, se observa una transición de estado metálico a semiconductor para presiones mayores a la presión crítica.

Fecha: Martes, 28 de marzo de 2023

Lugar: Auditorio del IFUAP, Edificio IF1

Horario: 1600 h



email: [tonacatl@ifuap.buap.mx](mailto:tonacatl@ifuap.buap.mx)  
Contacto: [seminario\\_estudiantes@ifuap.buap.mx](mailto:seminario_estudiantes@ifuap.buap.mx)  
Web: [ifuap.buap.mx/seminario/SeminarioEstudiantil.php](http://ifuap.buap.mx/seminario/SeminarioEstudiantil.php)  
Sociales: [facebook.com/SE.IFUAP](https://facebook.com/SE.IFUAP)