

PROPUESTA DE TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS

DATOS GENERALES DE LA PROPUESTA

Título de la propuesta: **Fases de Berry inducidas por magnetismo de large alcance**

Apellido y Nombres del director: **Jorge I. Facio**

Teléfono: **2944500168**

Dirección electrónica del director (ingresar una sola dirección): **facio.ji@gmail.com**

Cargo IB: **Jefe de Trabajos Prácticos**

¿Propone codirector? : **NO**

Datos Co-director:

Dirección electrónica del codirector (ingresar una sola dirección):

Título máximo alcanzado del codirector (Doctor, Magister, otros) :

Cargo docente del codirector en el IB (no excluyente):

Justifique brevemente el rol del Codirector:

Lugar de realización: **Grupo de Teoría de la Materia Condensada**

DETALLE TÉCNICO DE LA PROPUESTA

Orientación:

Materia Condensada

Breve descripción: **En un sistema cuántico, la fase de la función de onda puede no volver a su valor original al variar parámetros relevantes del sistema en un ciclo cerrado. La fase acumulada en este contexto lleva el nombre de Michael Berry, quien descubrió su relevancia para una variedad de efectos cuánticos [1,2]. En el caso de sistemas electrónicos, la fase de Berry cumple un rol esencial en muchos fenómenos tales como el efecto Hall a campo magnético nulo o en la polarización electrónica en sistemas extendidos.**

Este último caso es quizá el ejemplo más notable de la relación entre propiedades puramente geométricas de la estructura electrónica y observables experimentales: la polarización electrónica en sistemas periódicos se puede calcular como una fase de Berry. El espacio de parámetros asociado a esta fase está definido por la conexión adiabática entre un sistema de referencia centrosimétrico y el sistema de interés donde, por el contrario, usualmente la simetría de inversión está espontáneamente rota.

Cuando estos dos sistemas difieren en el ordenamiento espacial de los átomos en la estructura cristalina es usualmente trivial establecer la conexión adiabática: basta con identificar la distorsión espacial que da lugar a la ruptura de la simetría de inversión. Menos trivial es el caso donde la estructura cristalina esencialmente preserva la simetría de inversión y el responsable primario de la ruptura espontánea de la simetría de inversión espacial está codificado en grados de libertad magnéticos. Este caso es de interés particular pues es relevante para muchos sistemas multiferroicos que rompen simultáneamente las simetrías de inversión espacial y temporal. Esta propuesta de tesis se enfoca en el estudio y cálculo de fases de Berry en esta subclase de materiales.

El objetivo es implementar el cálculo numérico de la polarización electrónica desde primeros

principios. Esto requerirá familiarizarse con el cálculo de propiedades electrónicas en el contexto de la Teoría de Funcional Densidad. La propuesta llevará también a introducirse en el cálculo de invariantes topológicos de la estructura electrónica. El tema es flexible y puede centrarse más en el modelado microscópico y detallado de ciertos materiales de interés, o puede tener un enfoque de big data y enfocarse en el cálculo y análisis estadístico de un mayor número de materiales.

[1] Michael Berry, Proceedings of the Royal Society A. 392 (1802): 45–57 (1984)

[2] Michael Berry, Physics Today 43, 12, 34 (1990)

[3] Raffaele Resta. Rev. Mod. Phys. 66, 899 (1994)

Metodología principal: **Computacional**

Metodología secundaria:

Información adicional:

¿Propone que el tema sea considerado para suplemento de beca por tema prioritario?**NO**

Justifique porqué su propuesta debe ser considerada como tema prioritario:

Indique Gerente o Jefe de Departamento que avala su petición: