

PROPUESTA DE TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS

DATOS GENERALES DE LA PROPUESTA

Título de la propuesta: **Aislantes de Mott en pozos cuánticos de óxidos de metales de transición**

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

Teléfono:

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: **De acuerdo al teorema de Bloch, cuando un electrón se encuentra en un potencial periódico, se comporta como una onda plana extendida. Esto puede cambiar cuando en lugar de un electrón se tiene un número de electrones comparable al de átomos que dan lugar al potencial periódico. En particular, la interacción electrón-electrón puede hacer que los electrones pierdan su movilidad, en lo que se conoce como una transición metal-aislante. Incluso sin llegar a este extremo, la dualidad entre un carácter más localizado y otro más extendido de los electrones se evidencia en las propiedades electrónicas de diversos materiales.**

Una clase de compuestos muy relevante es la de óxidos de metales de transición, donde numerosas propiedades electrónicas suelen verse fuertemente afectadas por correlaciones entre electrones. Recientemente, un trabajo experimental en pozos cuánticos basados en SrVO₃ y SrTiO₃ ha indicado la existencia de una transición metal-aislante como función del espesor [1]. El resultado es atractivo pues naturalmente poder controlar eficientemente una transición metal-aislante es interés tecnológico.

Si bien la Ref. [1] también reporta cálculos de la estructura electrónica de este tipo de heteroestructura basados en la teoría de funcional densidad, un entendimiento cabal de la fenomenología presentada es muy deseable, por ejemplo, para entender cómo la transición metal-aislante depende del espesor de las multicapas.

En este proyecto de tesis de maestría, en colaboración con A. A. Aligia, se propone abordar el estudio de las correlaciones electrónicas en multicapas de SrVO₃ y SrTiO₃. En una primera etapa, se realizarán cálculos de primeros principios basados en teoría de funcional densidad, como los realizados en Ref. [2] con el objetivo de generar modelos donde sea más tratable el problema de

interacciones fuertes entre electrones. En una segunda etapa, se abordará el estudio de estos modelos con técnicas de muchos cuerpos, por ejemplo bosones esclavos, que se han usado anteriormente para determinar la transición metal-aislante [3,4,5].

[1] R. Yukawa et al. Nature Communications 12:7070 (2021) <https://doi.org/10.1038/s41467-021-27327-z>

[2] R. C. Vidal, H. Bentmann, J. I. Facio, et al. Physical Review Letters 126 (17), 176403 (2021)

[3] J. I. Facio, V. Vildosola, D. J. García, P. S. Cornaglia. Physical Review B 95 (8), 085119 (2017)

[4] A. A. Aligia, P. Petrone, J.O. Sofo, and B. Alascio, Phys. Rev. B 64, 092414 (2001)

[5] P. Petrone and A. A. Aligia, Phys. Rev. B 66, 104418 (2002).

Metodología principal: **Computacional**

Metodología secundaria: **Teórico**

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: