

PROPUESTA DE TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS

DATOS GENERALES DE LA PROPUESTA

Título de la propuesta: **“Estudio de modelos de electrones correlacionados con métodos numéricos basados en información cuántica”**

Apellido y Nombres del director: **Hallberg, Karen**

Teléfono: **2944686354**

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

Cargo IB: **Profesora Asociada**

¿Propone codirector? : **SÍ**

Datos Co-director: **No propongo codirector, pero no me deja clicar sobre la opción NO.**

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: **División Teoría de la Materia Condensada, CAB**

DETALLE TÉCNICO DE LA PROPUESTA

Orientación:

Materia Condensada

Breve descripción: **Proponemos estudiar modelos de electrones fuertemente correlacionados con métodos numéricos de vanguardia basados en información cuántica llamados redes de tensores (Tensor Networks), en particular, con el DMRG (Density Matrix Renormalization Group) [1,2].**

Los materiales con electrones fuertemente interactuantes dan lugar a fenómenos físicos emergentes y de interés tecnológico como la superconductividad de alta temperatura, las transiciones metal-aislante y topológicas, la existencia de cuasipartículas, entre otros.

Estas propiedades provienen del comportamiento cuántico de estos materiales. Debido a las interacciones electrónicas, no podemos estudiarlos desde la teoría de un electrón, sino que debemos apelar a la teoría de muchos cuerpos. En este caso, la cantidad de estados que debemos considerar aumenta exponencialmente con el número de partículas o de sitios y por eso para estudiarlos necesitamos usar algoritmos numéricos sofisticados. El DMRG se basa en conceptos de información cuántica para filtrar sólo los estados más relevantes siendo, actualmente, el método más preciso para estudiar problemas cuánticos interactuantes en baja dimensión (o en dimensiones mayores a temperatura nula).

Proponemos estudiar las propiedades estáticas y dinámicas de modelos paradigmáticos de estos materiales usando códigos desarrollados en nuestro grupo [1,2], en colaboración con Ignacio Lobato (estudiante de maestría) y de Nair Aucar (estudiante de doctorado). Gracias a la precisión de estos códigos, hemos podido observar estructuras interesantes y novedosas en la densidad de estado electrónica (que no pudieron ser observadas con otros métodos menos precisos), como estados dentro

del gap de Mott que tienen características de cuasipartículas holón-doblón [3,4]. Queremos entender estas estructuras, así como otras características que hemos observado como un pseudogap en la energía de Fermi y su posible relación con ondas de densidad de carga y superconductividad.

Bibliografía:

- [1] **New Trends in Density Matrix Renormalization, K. Hallberg, Advances in Physics, 55, 477-526 (2006)**
- [2] **Density-matrix algorithm for the calculation of dynamical properties of low dimensional systems K. Hallberg, Phys. Rev. B 52, 9827 (1995).**
- [3] **In-gap band in the one-dimensional two-orbital Kanamori-Hubbard model with inter-orbital Coulomb interaction, N. Aucar Boidi, H. Fernández García, Y. Núñez-Fernández, K. Hallberg, Phys. Rev. Research 3, 043213 (2021), <https://arxiv.org/abs/2112.03794>**
- [4] **Novel subbands in the doped two-orbital Kanamori-Hubbard model, K. Hallberg, Y. Núñez-Fernández, Phys. Rev. B 102, 245138 (2020), <https://arxiv.org/abs/2007.14923>**

Metodología principal: **Computacional**

Metodología secundaria: **Teórico**

Información adicional: **Algunas materias posibles para el plan de formación:**

Tópicos de Física Computacional

Teoría de muchos cuerpos

Machine Learning

Teoría de Grupos

Teoría de la información

Teoría de campos y materia condensada

Sólidos I

¿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: