

Título: APPLICATIONS OF MAXIMALLY LOCALIZED WANNIER FUNCTIONS: SPIN-FLIP EXCITATIONS, PLASMON DISPERSION AND TIGHT BINDING MODELS FOR OPTICAL LATTICES

Nombre: IBAÑEZ AZPIROZ, JULEN

Universidad: Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

Departamento: Física de la materia condensada

Fecha de lectura: 13/09/2013

Mención a doctor europeo: concedido

Programa de doctorado: Física y Tecnología de Materiales

Dirección:

- > **Director:** AITOR VERGARA JAUREGUI
- > **Director:** ASIER EIGUREN GOYENECHEA

Tribunal:

- > **presidente:** ANDRÉS ARNAU PINO
- > **secretario:** IDOIA GARCIA DE GURTUBAY GALLIGO
- > **vocal:** STEFAN BLÜGEL ---
- > **vocal:** JOSE IGNACIO PASCUAL CHICO
- > **vocal:** ALFONSO MUÑOZ GONZALEZ

Descriptor:

- > ESTADOS ELECTRONICOS EN LOS SOLIDOS
- > PROPIEDADES OPTICAS DE LOS SOLIDOS

El fichero de tesis no ha sido incorporado al sistema.

Resumen: En este proyecto, se han analizado diversas propiedades electrónicas de los materiales en un marco teórico constituido por las funciones maximalmente localizadas de Wannier (FMLW). Mediante este potente instrumento matemático que engloba los asíllamados cálculos de primeros principios, se ha podido acceder e investigar detalles de diversos sistemas. En primer lugar, se han estudiado excitaciones electrónicas en superficies constituidas por átomos pesados. En dicho tipo de superficies, el acoplamiento relativista spin-órbita tiene profundos efectos en las propiedades de los electrones. En estas condiciones, se ha simulado el efecto causado en estos electrones por un campo electromagnético externo. Las excitaciones asociadas a este proceso han sido calculadas mediante el uso de las FMLW. De este modo, se ha descubierto que la interacción spin-órbita puede determinar profundamente la cantidad de luz que una superficie puede absorber. En segundo lugar, se han estudiado excitaciones electrónicas colectivas (plasmones) en el sodio, variando la presión ejercida en el sistema de 0 a 180 Gpa. Dicho estudio ha sido posible gracias a que se ha expresado la función respuesta del sistema en términos de las FMLW, lo cual posibilita disminuir el coste de los cálculos computacionales considerablemente. De este modo, se ha descubierto un plasmon anisotrópico en una fase del

sodio que a priori no debería presentar grandes anisotropías. Se ha demostrado que dicho efecto está asociado a un efecto de la estructura de bandas no predicho por modelos simplificados. En tercer lugar, se han aplicado las FMLW al estudio teórico de átomos ultrafríos atrapados en redes ópticas. Las FMLW representan una base ideal para modelos tight-binding de estos sistemas debido al alto grado de localización de estas funciones en el espacio real. Los modelos construidos han sido capaces de reproducir el espectro de energía exacto con gran precisión, demostrando la utilidad de las FMLW fuera del contexto de la estructura electrónica de los materiales.