

Plan Overview

A Data Management Plan created using DMPTool-Stage

Title: Crossing bridges from high energy physics to condensed matter via anomalous transport

Creator: Alexandre Rocha - ORCID: [0000-0002-5305-9693](https://orcid.org/0000-0002-5305-9693)

Affiliation: São Paulo State University (unesp.br)

Principal Investigator: David Dudal, Ana Mizher, Filipe Matusalem

Funder: São Paulo Research Foundation (fapesp.br)

Template: Digital Curation Centre (português)

Project abstract:

Chiral matter is a next generation exciting subject in interdisciplinary physics. Intense research effort was triggered by the discovery of 2D materials like graphene exhibiting relativistic dispersion relations. Around the same time, people also advocated the possibility of magnetic field (rather than electric field!) assisted anomalous chiral transport phenomena in the quark-gluon plasma, as initiated by relativistic heavy ion collision experiments conducted at grand-scale facilities like ALICE (LHC) or RHIC (Brookhaven). A concrete, and experimental verified, condensed matter version of the "chiral magnetic effect" was already realized in the 3D material ZrTe5. We aim however at a 2D realization, which, unlike its 3D cousin, can lead to a topologically robust phenomenon.

The currently proposed project is therefore a very timely one and it will be a pioneering challenge at the interface of high energy particle and condensed matter physics, ranging from theory over numerical material simulations towards table-top experiments, with potential future applications as far-stretching as quantum computing.

Start date: 12-31-2021

End date: 12-30-2024

Last modified: 05-25-2021

Copyright information:

The above plan creator(s) have agreed that others may use as much of the text of this plan as they would like in their own plans, and customize it as necessary. You do not need to credit the creator(s) as the source of the language used, but using any of the plan's text does not imply that the creator(s) endorse, or have any

relationship to, your project or proposal

Crossing bridges from high energy physics to condensed matter via anomalous transport

O projeto proposto é teórico-computacional. Serão produzidos os seguintes dados:

1. Arquivos de estruturas cristalinas dos diferentes materiais (formato .cif, .xyz, .vasp) que podem ser utilizados tanto para visualização, quanto para a realização dos cálculos propriamente ditos
2. Arquivos de *input* dos códigos utilizados (Quantum ESPRESSO, Yambo, entre outros). A partir dos arquivos de output os resultados obtidos no projeto são 100% reprodutíveis. Os códigos utilizados são de domínio público e são gratuitos (*freeware*) para a comunidade acadêmica.
3. Arquivos de output que incluem informações sobre auto-estados e auto-valores de Kohn-Sham de diferentes materiais, bem como informações sobre distribuição eletrônica e dos modos de vibração. Os arquivos são do tipo texto (human readable) e binários (que podem ser processados utilizando ferramentas utilitárias dos códigos utilizados e que também são distribuídos de forma gratuita).
4. Os resultados serão descritos em figuras, gráficos, planilhas e/ou arquivos de texto.
5. Serão gerados scripts (shell ou python).
6. Os manuscritos de artigos para publicação dos resultados serão escritos em LaTeX (formato .tex) ou em word (.doc).

Conforme descrito acima, os dados serão gerados a partir de informações sobre estruturas cristalinas de materiais e utilizando códigos freeware de cálculos de primeiros princípios.

Será criado um banco de dados *searchable* contendo os diferentes parâmetros utilizados no cálculos que permitirá realizar buscas por material, tipo de estrutura (simetria), temperatura, e diferentes parâmetros de convergência dos cálculos.

Como o trabalho é teórico e não envolve organismos vivos, não há questões éticas associadas.

Não há previsão para que dados produzidos neste projeto tenham restrições para compartilhamento dos dados produzidos. Em particular, não se prevê questões associadas à propriedade intelectual

1. Todos os dados produzidos serão armazenados nos clusters de computadores do grupo e também na nuvem.
2. Os dados serão preservados por um período que levará em consideração o espaço de armazenamento. Em particular, arquivos de entrada e arquivos de saída em formato texto serão armazenados indefinidamente, de modo que os cálculos possam ser recuperados por outros usuários em qualquer momento. Arquivos binários, que tipicamente, necessitam de grande espaço de armazenamento serão mantidos por um período de 5 anos, e podem ser novamente obtidos a partir dos dados de entrada.
3. Os dados produzidos e efetivamente utilizados na produção dos artigos serão compartilhados após aceitação da publicação associada, e serão preservados e disponibilizados por tempo indeterminado nas plataformas descritas abaixo.

Os dados armazenados no drive compartilhado (do Google Drive) só podem ser acessados por pesquisadores com quem eles foram compartilhados explicitamente. Além disso, dada a estrutura desta parte do sistema, apenas usuários com um e-mail @unesp.br tem acesso ao drive para edição.

O armazenamento de longo prazo dos dados produzidos será realizado em um drive compartilhado no Google (a Unesp dispõe de Shared Drives no Google Acadêmico). O Drive permite acesso a todos os membros do grupo TransSim do IFT-UNESP.

Os arquivos associados às publicações (gráficos e texto) serão armazenados na nuvem no site Overleaf (www.overleaf.com) que permite a escrita de textos em LaTeX de forma colaborativa.

Os dados brutos utilizados especificamente em cada publicação serão depositados em um repositório do grupo no github (<https://github.com/reilya/TransSimPapers>) bem como arquivos de *input* e *output* e *scripts* utilizados no processamento dos dados. No github é possível disponibilizar os dados de maneira pública para que possam ser acessados por todos que tenham interesse.

Os dados disponibilizados aos membros do grupo e/ou a terceiros serão suficientes para reproduzir todos os dados resultados obtidos no projeto.

Conforme descrito acima, arquivos de entrada e saída, que permitem a reprodutibilidade dos resultados serão armazenados de maneira indefinida, uma vez que ocupam espaço relativamente pequeno.

Os dados brutos utilizados especificamente em cada publicação serão depositados em um repositório do grupo no github (<https://github.com/reilya/TransSimPapers>) bem como arquivos de *input* e *output* e *scripts* utilizados no processamento dos dados. No github é possível disponibilizar os dados de maneira pública para que possam ser acessados por todos que tenham interesse.

Não há restrições no compartilhamento dos dados.

O pós-doutorando que receberá a bolsa associada ao projeto e o pesquisador principal serão os responsáveis pela parte brasileira dos dados gerados, sua manutenção e armazenamento. O Prof. Dudal será o responsável pelos dados gerados pelo grupo de Leuven.

Todos os requisitos para que o plano seja corretamente executados já estão disponíveis por meio de ferramentas gratuitas ou fornecidas pela própria Unesp.
