

# PROYECTO DE TESIS

**Autor(es): Mitchell Mirano Caro**

Institución: Universidad Nacional Mayor de San Marcos

Fecha: 25 de junio de 2025

# Índice general

|             |                                                       |           |
|-------------|-------------------------------------------------------|-----------|
| <b>I.</b>   | <b>Información General del Estudio</b>                | <b>2</b>  |
| <b>II.</b>  | <b>Planteamiento del Estudio</b>                      | <b>4</b>  |
| 2.1         | Situación problemática . . . . .                      | 4         |
| 2.2         | Formulación del Problema . . . . .                    | 5         |
| 2.3         | Antecedentes del Problema . . . . .                   | 6         |
| 2.4         | Bases Teóricas . . . . .                              | 8         |
| 2.5         | Marco Conceptual . . . . .                            | 10        |
| 2.6         | Justificación de la Investigación . . . . .           | 13        |
| 2.7         | Objetivos de la Investigación . . . . .               | 15        |
| 2.8         | Hipótesis . . . . .                                   | 16        |
| <b>III.</b> | <b>Metodología</b>                                    | <b>17</b> |
| 3.1         | Tipo y diseño de investigación . . . . .              | 17        |
| 3.2         | Unidad de Análisis . . . . .                          | 18        |
| 3.3         | Población o Universo de Estudio . . . . .             | 18        |
| 3.4         | Tamaño de Muestra . . . . .                           | 18        |
| 3.5         | Técnicas de Recolección de Datos . . . . .            | 19        |
| 3.5.1       | Localización . . . . .                                | 20        |
| 3.6         | Análisis e Interpretación de la Información . . . . . | 20        |
| <b>IV.</b>  | <b>Presupuesto</b>                                    | <b>23</b> |
| <b>V.</b>   | <b>Cronograma</b>                                     | <b>24</b> |
| <b>VI.</b>  | <b>Bibliografía</b>                                   | <b>25</b> |
| <b>VII.</b> | <b>Anexos</b>                                         | <b>26</b> |

## I. Información General del Estudio

|                                     |                                                                                                                                                                                                                                                        |
|-------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>1.1 Título del estudio</b>       | Descubrimiento acelerado por IA de materiales 2D con Skyrmiones estables para aplicaciones espintrónicas                                                                                                                                               |
| <b>1.2 Responsable del estudio</b>  | Mitchell Mirano Caro                                                                                                                                                                                                                                   |
| <b>1.3 Asesor(es)</b>               | Rojas Ayala Chachi                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>1.4 Programa de UPG</b>          | Maestría en Física                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>1.4.1 Mención</b>                | Estado Sólido                                                                                                                                                                                                                                          |
| <b>1.5 Grupo de investigación</b>   | GMCAN – Grupo de Métodos Computacionales Aplicados a Nanomateriales                                                                                                                                                                                    |
| <b>1.5.1 Línea de investigación</b> | Ciencia de materiales avanzados y de estructuras artificiales.                                                                                                                                                                                         |
| <b>1.5.2 Área, sub-área (OCDE)</b>  | Área: <b>Ciencias Naturales</b><br>Sub-área: 1.1 Ciencias físicas (Física) 1.2 Ciencias e ingeniería de la computación e información<br>OCDE: 1.1.5 Física Atómica, Molecular y Química 1.2.1 Ciencias de la Computación 1.2.3 Inteligencia Artificial |
| <b>1.5.3 Códigos UNESCO</b>         | 2203.11 (Ciencia de la Información Cuántica)<br>1203 (Inteligencia Artificial)<br>1209 (Ciencia Computacional)                                                                                                                                         |
| <b>1.5.4 PACs numbers</b>           | 75.70.Kw (Propiedades magnéticas de nanoestructuras)<br>75.30.Ds (Interacciones de intercambio)<br>75.10.Lp (Simulaciones Monte Carlo)<br>07.05.Mh (Redes neuronales, lógica difusa, inteligencia artificial)                                          |
| <b>1.6 Fecha de presentación</b>    | 08/06/2025                                                                                                                                                                                                                                             |

## 1.7 Resumen Ejecutivo

Este proyecto de tesis propone una metodología computacional avanzada para el descubrimiento y caracterización acelerada de materiales bidimensionales (2D) con skyrmiones magnéticos estables, esenciales para el desarrollo de tecnologías espintrónicas de próxima generación. La investigación se centra en tri-haluros metálicos  $MCl_3$  ( $M = V, Cr$ ), materiales intrínsecamente centrosimétricos, donde la estabilización de skyrmiones se explora a través de la interacción Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) que surge de su configuración atómica y posibles dopajes.

La metodología integra cálculos de primeros principios (DFT) para derivar parámetros magnéticos clave ( $J, D, K$ ) utilizando el formalismo de Liechtenstein. Estos parámetros alimentarán simulaciones de Monte Carlo (empleando técnicas como *simulated annealing*), que permitirán explorar extensivamente configuraciones de espín, generar diagramas de fase campo-temperatura (B–T) y modelar la emergencia de texturas topológicas como skyrmiones y merones.

Para la eficiente clasificación y caracterización de estas fases magnéticas, se desarrollará y entrenará una red neuronal tipo Vision Transformer (ViT) a partir del vasto conjunto de datos generado por las simulaciones. Este enfoque multiescala y asistido por IA busca superar las limitaciones del análisis manual de grandes volúmenes de datos, facilitando el diseño racional de nuevos materiales espintrónicos de alto rendimiento, incluyendo el estudio sistemático del impacto de impurezas magnéticas (Fe, Mn) en la estabilidad, helicidad y número topológico de los skyrmiones.

## II. Planteamiento del Estudio

### 2.1 Situación problemática

El desarrollo tecnológico contemporáneo, particularmente en los sistemas de almacenamiento y procesamiento de información, se aproxima a los límites físicos impuestos por la ley de Moore. Esto genera desafíos crecientes en miniaturización, eficiencia energética y estabilidad operativa, impulsando la búsqueda de nuevos paradigmas computacionales.

Ante este panorama, la espintrónica emerge como una alternativa viable de gran importancia. Al explotar el espín intrínseco de los electrones como portador de información, posibilitaría la concepción de dispositivos de alta densidad, bajo consumo energético y mayor robustez operativa, con un interés significativo en la comunidad científica e ingenieril. En este contexto, los skyrmiones magnéticos, como estructuras topológicas del campo de espín, han captado creciente atención por su estabilidad, dimensiones nanométricas y un potencial de aplicabilidad que representa una novedad en las tecnologías de memoria tipo *racetrack* y la lógica espintrónica.

No obstante, el descubrimiento racional y la ingeniería de materiales que alojen skyrmiones bajo condiciones compatibles con aplicaciones tecnológicas prácticas (como temperaturas cercanas a la ambiente, control preciso de su helicidad y bajo efecto Hall topológico) representan un problema complejo y aún no resuelto. Los materiales tradicionalmente estudiados, como los imanes no centrosimétricos, a menudo presentan limitaciones significativas en términos de estabilidad, eficiencia y escalabilidad, lo que restringe su viabilidad para aplicaciones a gran escala.

En este marco, los materiales bidimensionales (2D), y en particular los trihaluros metálicos de van der Waals ( $MCl_3$ , con  $M = V, Cr$ ), han surgido como candidatos especialmente prometedores. Estos materiales son intrínsecamente centrosimétricos, pero la estabilización de skyrmiones se puede explorar a través de la interacción Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) que surge de su configuración atómica y posibles dopajes. Su capacidad para albergar skyrmiones manipulables y sintonizables mediante exfoliación, presión o dopado con impurezas magnéticas es notable. Sin embargo, el efecto preciso del dopado, específicamente con impurezas magnéticas como Fe y Mn, sobre la aparición, estabilidad y dinámica de las fases magnéticas topológicas en estos sistemas aún no ha sido caracterizado de manera sistemática. Esta falta de comprensión representa un vacío en el conocimiento y un obstáculo para su aplicación práctica, lo que subraya la novedad e

interés de esta investigación.

La identificación y el diseño de materiales 2D con propiedades magnéticas óptimas, como una DMI robusta, anisotropía apropiada e interacciones de intercambio controlables, requieren el uso de métodos computacionales de alta precisión. Los cálculos de primeros principios basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) son herramientas indispensables para derivar estos parámetros fundamentales ( $J, D, K$ ) con gran exactitud. No obstante, el elevado costo computacional de los métodos DFT limita severamente su aplicabilidad en estudios de cribado masivo de materiales, comprometiendo la viabilidad de exploraciones exhaustivas. Complementariamente, la caracterización de las fases topológicas que emergen de estas interacciones requiere simulaciones de Monte Carlo bajo una amplia gama de condiciones de temperatura y campo magnético. Estas simulaciones, aunque esenciales, generan volúmenes considerables de datos (configuraciones de espín, diagramas de fase campo-temperatura (B-T), y la modelización de merones) cuya interpretación y clasificación mediante enfoques tradicionales resultan ineficientes.

Frente a esta problemática, se identifica la necesidad crítica de desarrollar una metodología computacional multiescala y asistida por inteligencia artificial que permita acelerar significativamente tanto la predicción de propiedades magnéticas como la clasificación automática de fases topológicas. Este enfoque representa una solución novedosa y viable para superar las limitaciones actuales.

## 2.2 Formulación del Problema

El problema central de esta investigación consiste en la ineficiencia y las limitaciones inherentes de los métodos computacionales tradicionales para el descubrimiento y la caracterización exhaustiva de materiales bidimensionales (2D) con skyrmiones estables bajo condiciones operativas relevantes. Este problema se manifiesta en dos aspectos fundamentales:

1. La derivación de parámetros magnéticos ( $J, D, K$ ) a partir de cálculos de primeros principios (DFT) es computacionalmente costosa, lo que impide un cribado eficiente y sistemático de nuevos materiales o la exploración de extensas configuraciones de dopaje en compuestos como los trihaluros metálicos  $MCl_3$  ( $M = V, Cr$ ).
2. La clasificación y el análisis de las complejas fases magnéticas topológicas (skyrmiones, bimerones, antiskyrmiones, merones, estados espirales) que emergen de las simulaciones de Monte Carlo bajo diversas condiciones termodinámicas resultan ineficaces debido al gran volumen y la granularidad de los datos generados. Además, la comprensión actual de cómo las perturbaciones estructurales inducidas por el dopaje (con impurezas magnéticas como Fe y Mn) afectan propiedades críticas como

la estabilidad, la helicidad y el número topológico de los skyrmiones, así como su impacto en fenómenos de transporte como el efecto Hall topológico, es aún incipiente y requiere un estudio sistemático.

Para abordar esta problemática, la presente investigación propone desarrollar una metodología computacional avanzada que integre la derivación de parámetros magnéticos de DFT (utilizando el formalismo de Liechtenstein), simulaciones de Monte Carlo para la exploración de diagramas de fase B-T, y el desarrollo y aplicación de técnicas de Inteligencia Artificial, específicamente redes neuronales tipo *Vision Transformer* (ViT), para la clasificación automática de fases magnéticas topológicas a partir de configuraciones de espín. Adicionalmente, se realizará un estudio sistemático del impacto de impurezas magnéticas (Fe, Mn) en las propiedades de estas texturas en materiales  $MCl_3$  2D, incluyendo su helicidad, número topológico y su potencial para aplicaciones en espintrónica, particularmente en fenómenos de transporte como el efecto Hall topológico.

De este modo, el aspecto que se desarrollará científicamente se centra en la creación y validación de una metodología computacional multiescala y asistida por IA que optimice el descubrimiento y la caracterización de materiales 2D con propiedades magnéticas topológicas deseadas, a la vez que profundiza en la comprensión de cómo el dopaje puede modular estas propiedades. Este enfoque innovador y su aplicación se reflejan directamente en el título de la investigación: *"Descubrimiento acelerado por IA de materiales 2D con Skyrmiones estables para aplicaciones espintrónicas"*.

## 2.3 Antecedentes del Problema

La investigación de texturas magnéticas no colineales, como los skyrmiones, ha experimentado un notable avance desde que se demostró teóricamente su existencia como vórtices termodinámicamente estables en ciertos cristales con orden magnético. El trabajo seminal en este campo estableció que, en presencia de un campo magnético externo, la energía de interacción no homogénea (específicamente, la interacción Dzyaloshinskii-Moriya o DMI) puede favorecer la formación de un estado mixto de vórtices magnéticos, análogo al estado mixto de los superconductores tipo II (Bogdanov & Yablonskii, 1989). Este descubrimiento sentó las bases teóricas para la búsqueda y el estudio de fases topológicas en una amplia gama de materiales magnéticos.

Para modelar de manera realista y predictiva estos complejos fenómenos magnéticos, la comunidad científica ha adoptado un enfoque multiescala que se ha consolidado como una herramienta fundamental. Este enfoque integra la teoría del funcional de la densidad (DFT) con simulaciones numéricas a mayor escala. La metodología consiste en utilizar cálculos de primeros principios (DFT) para obtener con precisión los parámetros magnéticos fundamentales de un material, como las constantes de intercambio de Heisenberg

( $J$ ), los vectores Dzyaloshinskii-Moriya ( $D$ ) y la anisotropía magnetocristalina ( $K$ ). Posteriormente, estos parámetros se emplean para construir un Hamiltoniano de espín clásico, cuya dinámica y estados de equilibrio se exploran mediante simulaciones de Monte Carlo (Borisov, 2023). Este procedimiento permite conectar la estructura electrónica a escala atómica con el comportamiento magnético macroscópico, posibilitando no solo la comprensión de materiales existentes, sino también la predicción de nuevos compuestos con propiedades magnéticas deseadas (Borisov, 2023).

En este contexto, los materiales bidimensionales (2D) de van der Waals, y en particular los tri-haluros metálicos ( $MX_3$ ), han surgido como una plataforma prometedora para la espintrónica. Estudios sistemáticos basados en DFT han destacado la importancia de comprender la influencia de la estructura cristalina (apilamiento y grupo espacial) en las propiedades electrónicas y magnéticas de compuestos como  $VCl_3$  y  $CrCl_3$  (Dutta et al., 2023). Recientemente, la aplicación del enfoque multiescala a estos materiales ha revelado hallazgos significativos. Se ha demostrado que, a pesar de su estructura cristalina centrosimétrica, compuestos como  $VCl_3$  y  $CrCl_3$  pueden albergar interacciones DMI no despreciables, originadas por la ruptura de la simetría de inversión local. Estas interacciones son suficientes para estabilizar skyrmiones de tamaño nanométrico ( $\sim 2$  nm), lo cual es altamente prometedor para aplicaciones en dispositivos de memoria de alta densidad (Tran & Matsushita, 2024). Notablemente, se ha predicho que los skyrmiones en  $VCl_3$  y  $CrCl_3$  poseen helicidades opuestas, lo que sugiere que el dopaje podría ser un mecanismo viable para controlar esta propiedad fundamental (Tran & Matsushita, 2024).

La influencia de las impurezas y el desorden en la estabilidad de las fases topológicas es un área de investigación activa y crucial para el desarrollo de aplicaciones prácticas. Simulaciones de Monte Carlo han explorado el efecto del desorden de enlaces aleatorios, análogo a la sustitución química en sitios no magnéticos. Estos estudios han encontrado que, si bien un desorden moderado puede romper el orden helicoidal de largo alcance, puede simultáneamente inducir la formación de fases topológicas como los bimerones. Sorprendentemente, las características topológicas de la red de skyrmiones pueden persistir incluso con altas amplitudes de desorden, y en ciertos modelos, el desorden puede incluso expandir la región de estabilidad de la fase de skyrmiones (Iroulart et al., 2024). Estos resultados subrayan la robustez de las texturas topológicas y la rica fenomenología que emerge en sistemas dopados.

La vasta cantidad de datos generados por las simulaciones de Monte Carlo, que exploran diagramas de fase en función de la temperatura y el campo magnético, presenta un desafío significativo para la identificación y clasificación eficiente de las distintas fases magnéticas. Para abordar este cuello de botella, se han comenzado a aplicar técnicas de Inteligencia Artificial. Investigaciones previas han demostrado la eficacia de las Redes Neuronales Convolucionales (CNN) para la identificación multi-etiqueta de diversas texturas magnéticas, incluyendo antiskyrmiones, bimerones y fases helicoidales, a partir de



configuraciones de espín obtenidas en simulaciones (Araz et al., 2022). Un avance clave de este enfoque es la capacidad de la red para predecir la emergencia de una fase en etapas tempranas de la simulación, acelerando drásticamente la exploración del espacio de parámetros (Araz et al., 2022).

Más recientemente, se ha explorado el uso de arquitecturas de atención más avanzadas, como los Vision Transformers (ViT), para la clasificación de fases en modelos de física estadística. Se ha demostrado que los modelos ViT, pre-entrenados y ajustados con un número limitado de configuraciones de espín, pueden superar el rendimiento de las CNN de última generación en la predicción de variables de estado en simulaciones del modelo de Ising (Kara et al., 2021). Además del aumento en la precisión, los ViT ofrecen la ventaja de la interpretabilidad a través de sus mapas de atención, lo que abre una vía para correlacionar los patrones visuales aprendidos por el modelo con la física subyacente de las transiciones de fase (Kara et al., 2021). Este potencial convierte a los ViT en una herramienta particularmente atractiva para el análisis de sistemas magnéticos complejos. Finalmente, la integración de estas tecnologías en materiales 2D tiene el potencial de revolucionar el hardware computacional, ofreciendo un paradigma para la computación neuromórfica con un consumo energético ultra-bajo, alta velocidad y escalabilidad sin precedentes, abordando así los desafíos de la inteligencia artificial y el Internet de las Cosas (Plummer et al., 2024).

## 2.4 Bases Teóricas

La presente investigación se fundamenta en un cuerpo teórico interdisciplinario que integra la física del magnetismo en sólidos, los métodos computacionales de primeros principios y las técnicas modernas de aprendizaje profundo. Este marco proporciona las herramientas conceptuales y metodológicas necesarias para abordar el descubrimiento y caracterización de fases magnéticas topológicas en materiales bidimensionales, mediante una estrategia multiescala que vincula directamente cálculos *ab initio* con simulaciones estocásticas y análisis automatizado de datos.

El magnetismo en materiales sólidos tiene un origen cuántico, asociado al espín electrónico y a las interacciones entre momentos magnéticos localizados. Estas interacciones surgen de los principios fundamentales de la mecánica cuántica, como el principio de exclusión de Pauli y la repulsión de Coulomb. En este contexto, el modelo de Heisenberg describe eficazmente las interacciones de intercambio entre espines localizados, a través de un parámetro  $J_{ij}$  que determina si la interacción favorece el alineamiento paralelo (ferromagnetismo) o antiparalelo (antiferromagnetismo). Sin embargo, para sistemas sin simetría de inversión, como los dopados asimétricamente o con ruptura estructural, emerge además la interacción de Dzyaloshinskii–Moriya (DMI), representada por el vector

$\vec{D}_{ij}$ , que promueve configuraciones de espín no colineales y chirales. Complementariamente, la anisotropía magnetocristalina  $K$  impone una dirección de alineamiento preferente, esencial para la estabilización de texturas magnéticas bajo fluctuaciones térmicas.

Para obtener estos parámetros fundamentales con precisión, se emplea la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), un enfoque de primeros principios que permite calcular propiedades electrónicas y magnéticas sin necesidad de parámetros empíricos. Fundada en los teoremas de Hohenberg-Kohn y Kohn-Sham, la DFT transforma el problema de muchos cuerpos electrónicos en uno de partículas independientes bajo un potencial efectivo. En materiales con orbitales parcialmente ocupados, como los metales de transición, se requiere la inclusión de la corrección de Hubbard (DFT+U) para capturar adecuadamente los efectos de correlación local. Adicionalmente, la extensión LSDA (Local Spin Density Approximation) permite tratar sistemas con polarización de espín.

Los parámetros magnéticos interatómicos necesarios para las simulaciones se derivan directamente de los resultados DFT utilizando el formalismo de Liechtenstein (LKAG). Este método, basado en funciones de Green, permite calcular de forma rigurosa las constantes de intercambio  $J_{ij}$ , los vectores DMI  $\vec{D}_{ij}$  y los términos de anisotropía  $K_i$  incorporando explícitamente el acoplamiento espín-órbita. De este modo, se construye un Hamiltoniano efectivo de espines clásicos que representa fielmente el comportamiento magnético del sistema a escala atómica.

Este Hamiltoniano es la base de las simulaciones de Monte Carlo que se desarrollan en este trabajo. Mediante el algoritmo de Metrópolis y técnicas como el recocido simulado, se explora el espacio de configuraciones de espín bajo diferentes condiciones de temperatura y campo magnético. Las simulaciones permiten mapear diagramas de fase  $(B, T)$  y caracterizar la emergencia de texturas topológicas como skyrmiones, merones, bimerones y antiskyrmiones. Estas configuraciones se estabilizan como resultado de la competencia entre  $J$ ,  $\vec{D}$  y  $K$ , por lo que el vínculo directo entre los cálculos DFT y las simulaciones Monte Carlo garantiza una representación físicamente fundamentada de las fases observadas.

El análisis de los datos generados por estas simulaciones requiere herramientas avanzadas de clasificación automática. En este sentido, se implementa un modelo de aprendizaje profundo basado en Vision Transformers (ViT), una arquitectura que emplea mecanismos de auto-atención para capturar relaciones espaciales complejas en datos visuales. A diferencia de las redes convolucionales tradicionales, los ViT permiten representar dependencias globales y no locales, siendo particularmente eficaces en la identificación de patrones topológicos dispersos, como los presentes en configuraciones de espín. El modelo se entrena utilizando imágenes generadas a partir de configuraciones de espín obtenidas en las simulaciones, lo que permite la clasificación eficiente y precisa de las distintas fases magnéticas.

En conjunto, el presente estudio se apoya en un marco teórico coherente que enlaza de manera explícita los niveles ab initio, mesoscópico y algorítmico. Este enfoque multiescala

permite no sólo comprender los mecanismos fundamentales que gobiernan la formación de texturas magnéticas topológicas, sino también acelerar su caracterización mediante técnicas de inteligencia artificial, contribuyendo así al diseño racional de materiales funcionales para aplicaciones espintrónicas avanzadas.

## 2.5 Marco Conceptual

En el presente trabajo se emplean conceptos especializados provenientes de la física del magnetismo, la simulación computacional y el aprendizaje profundo. A continuación, se precisan los términos fundamentales que guiarán el desarrollo metodológico y analítico de esta investigación.

### *Parámetro de Intercambio de Heisenberg ( $J$ )*

El parámetro  $J_{ij}$  cuantifica la intensidad y la naturaleza de la interacción de intercambio entre espines localizados en los sitios  $i$  y  $j$  de una red cristalina. Su signo determina el tipo de orden magnético preferido: si  $J_{ij} > 0$ , el sistema tiende a un orden ferromagnético, favoreciendo alineamientos paralelos de los espines; si  $J_{ij} < 0$ , se promueven configuraciones antiferromagnéticas, donde los espines tienden a alinearse antiparalelamente. Este parámetro se deriva de cálculos de primeros principios mediante el formalismo de Liechtenstein, partiendo de la estructura electrónica del sistema obtenida por la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). En el contexto de las simulaciones de Monte Carlo,  $J$  se incorpora directamente en el Hamiltoniano clásico del sistema como un término bilineal de la forma  $-\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ , donde  $\vec{S}_i$  representa el vector de espín clásico unitario en el sitio  $i$ .

### *Interacción de Dzyaloshinskii–Moriya ( $D$ )*

La interacción de Dzyaloshinskii–Moriya (DMI), representada por el vector  $\vec{D}_{ij}$ , es una interacción antisimétrica que emerge en sistemas con acoplamiento espín–órbita y en ausencia de simetría de inversión. Su expresión general en el Hamiltoniano se formula como  $-\sum_{\langle ij \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j)$ . Esta interacción es fundamental por favorecer configuraciones de espín con quiralidad definida, como los skyrmiones y antiskyrmiones. La dirección y magnitud de  $\vec{D}_{ij}$  son intrínsecamente dependientes de la geometría específica del sistema, el tipo de dopaje incorporado y los efectos de relatividad incluidos en los cálculos de DFT con acoplamiento espín–órbita. Su inclusión en el modelo de Monte Carlo es crucial para

capturar y simular texturas magnéticas no colineales de naturaleza topológica.

### ***Anisotropía Magnetocristalina ( $K$ )***

La anisotropía magnetocristalina representa la energía preferencial asociada a la orientación del vector de espín respecto a los ejes cristalográficos de la red. Matemáticamente, este término se modela comúnmente como  $-K \sum_i (\vec{S}_i \cdot \hat{n})^2$ , donde  $\hat{n}$  denota la dirección del eje de anisotropía preferente. Un valor positivo de  $K$  favorece la alineación perpendicular al plano (anisotropía uniaxial perpendicular), mientras que un valor negativo promueve la alineación de los espines dentro del plano. Este parámetro es de vital importancia para determinar la estabilidad de las texturas magnéticas frente a la desorientación térmica. Su cálculo se realiza a partir de DFT, con la inclusión explícita del acoplamiento espín-órbita. En las simulaciones de Monte Carlo,  $K$  regula la energía de orientación y condiciona de manera significativa la formación de estructuras magnéticas específicas, como los skyrmiones de tipo Bloch o Néel.

### ***Hamiltoniano Clásico y Simulación de Monte Carlo***

A partir de los parámetros magnéticos fundamentales  $J_{ij}$ ,  $\vec{D}_{ij}$  y  $K$ , obtenidos de cálculos de primeros principios, se construye un Hamiltoniano clásico de espines. Este Hamiltoniano describe la energía total del sistema magnético a temperatura finita, formulado como:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{\langle ij \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) - K \sum_i (\vec{S}_i \cdot \hat{n})^2 - \mu \sum_i \vec{B} \cdot \vec{S}_i.$$

En esta expresión, el último término representa la energía de Zeeman, que describe la interacción de los espines con un campo magnético externo  $\vec{B}$ , donde  $\mu$  es el momento magnético del espín. Este modelo energético es explorado mediante simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis, un método estocástico en el que se generan múltiples configuraciones de espín con una probabilidad proporcional a su peso de Boltzmann. El sistema evoluciona a través de actualizaciones aleatorias de espín, las cuales son aceptadas con base en la reducción de la energía total o siguiendo el criterio de Metropolis, lo que permite simular el equilibrio térmico a diferentes temperaturas. Se emplean técnicas de optimización como el *simulated annealing* para alcanzar estados metaestables y explorar eficientemente configuraciones de mínima energía global, incluyendo la emergencia y estabilización de skyrmiones y merones.

## *Transformers y Vision Transformers (ViT)*

El modelo **Transformer**, introducido por (Vaswani et al., 2017) constituye un hito en el desarrollo de arquitecturas de aprendizaje profundo. Diseñado originalmente para tareas de procesamiento de lenguaje natural, su principal innovación radica en el mecanismo de **auto-atención** (*self-attention*), el cual permite capturar dependencias de largo alcance entre los elementos de una secuencia sin necesidad de recurrencia ni convoluciones.

Este mecanismo se basa en la construcción de representaciones ponderadas para cada posición de entrada a partir de combinaciones lineales de otras posiciones, ponderadas según su relevancia relativa. Matemáticamente, la atención escalada por producto punto se expresa como:

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax} \left( \frac{QK^\top}{\sqrt{d_k}} \right) V,$$

donde  $Q$  son las *consultas* (queries),  $K$  las *claves* (keys) y  $V$  los *valores* (values), todos ellos obtenidos como proyecciones lineales de la entrada. La constante de escalado  $d_k$  corresponde a la dimensión de las claves y se introduce para evitar que productos escalares de gran magnitud generen gradientes pequeños o inestables tras la operación softmax.

Gracias a este mecanismo, el modelo es capaz de aprender a identificar y asignar peso a las relaciones contextuales más relevantes entre las entradas, lo que resulta en una mayor capacidad de representación y generalización.

La versión adaptada de esta arquitectura para el procesamiento de imágenes es conocida como **Vision Transformer (ViT)**. A diferencia de las redes neuronales convolucionales (CNNs) tradicionales, que procesan imágenes mediante filtros locales, los ViT abordan la imagen de una manera análoga a cómo los Transformers manejan secuencias de texto. Esto se logra dividiendo la imagen de entrada en una serie de **pequeños parches de tamaño fijo**, por ejemplo, de  $16 \times 16$  píxeles. Cada uno de estos parches se linealiza, convirtiéndose en un vector plano.

Estos vectores linealizados son luego **proyectados a un espacio latente** de mayor dimensión, lo que les permite ser procesados por los bloques Transformer. Para preservar la información espacial intrínseca de la imagen original, la cual se pierde al linealizar los parches, se añade una **codificación posicional** a cada vector. Esta codificación, que puede ser aprendida o fija, proporciona al modelo información sobre la ubicación relativa de cada parche dentro de la imagen. La secuencia resultante de vectores (parches linealizados + codificaciones posicionales) se procesa secuencialmente a través de múltiples **bloques Transformer**. Cada bloque está compuesto por capas de **atención multi-cabeza** (*multi-head attention*) y redes *feedforward*. La atención multi-cabeza permite al

modelo atender a diferentes "subespacios" de la información de entrada de manera paralela, enriqueciendo la capacidad de aprender relaciones complejas.

La principal ventaja de los ViT sobre las CNNs radica en su capacidad para **aprender dinámicamente qué regiones de la imagen son relevantes y cómo deben ser correlacionadas**, sin la limitación de filtros rígidos que solo capturan patrones locales. Esto los hace excepcionalmente potentes para detectar patrones espaciales complejos y distribuidos, como los que caracterizan a las configuraciones de espín con estructuras topológicas (skyrmiones, merones, etc.), donde las interacciones y formas pueden manifestarse a través de grandes extensiones del sistema.

En el marco de esta investigación, las representaciones bidimensionales de las configuraciones de espín, generadas por las simulaciones de Monte Carlo y los diagramas de fase Campo-Temperatura ( $B - T$ ), se tratarán como **imágenes de entrada** para el modelo ViT. Este modelo será entrenado para identificar, clasificar y correlacionar automáticamente diversas fases magnéticas topológicas, incluyendo skyrmiones, merones y estados espirales, basándose en sus patrones morfológicos distintivos. La capacidad del ViT para capturar relaciones a largo alcance y patrones complejos es crucial para diferenciar con precisión estas estructuras magnéticas sutiles, superando las limitaciones del análisis manual de grandes volúmenes de datos.

## 2.6 Justificación de la Investigación

La presente investigación se justifica por su elevada relevancia científica, tecnológica, institucional y nacional, marcando un hito en el avance del conocimiento fundamental y aplicado en el campo de la espintrónica y la ciencia de materiales. A nivel global, la búsqueda de materiales para dispositivos espintrónicos de nueva generación, como memorias de alta densidad, lógica de bajo consumo energético y nuevos paradigmas de computación, es un área de investigación prioritaria. Los skyrmiones magnéticos, con su estabilidad topológica y tamaño nanométrico, se erigen como candidatos clave en esta revolución tecnológica. Sin embargo, su implementación práctica requiere el descubrimiento y la caracterización detallada de nuevos materiales que los alberguen y que posean propiedades tecnológicamente adecuadas (e.g., estabilidad a temperatura ambiente, manipulabilidad eficiente). Los tri-haluros metálicos de van der Waals (como el  $\text{MCl}_3$ ) representan una clase emergente de materiales 2D con propiedades magnéticas excepcionales, prometedores para la formación de skyrmiones pequeños y estables. Este estudio contribuirá a la comprensión fundamental de los mecanismos de formación y control de skyrmiones en tri-haluros  $\text{MCl}_3$  mediante el dopamiento con impurezas magnéticas. El dopamiento es un método versátil para ajustar propiedades cruciales como la interacción Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) y la anisotropía, las cuales influyen directamente en la estabilidad, tamaño

y helicidad de los skyrmiones. La posibilidad de controlar la helicidad de los skyrmiones a través de la naturaleza del átomo metálico y el tipo de dopante abre vías para nuevas funcionalidades en dispositivos espintrónicos, abordando una brecha de conocimiento en este campo.

La investigación propuesta es metodológicamente de vanguardia, al integrar y aplicar de manera sinérgica un conjunto de herramientas computacionales avanzadas. Esto incluye cálculos de primeros principios (DFT y DFT+U) para una descripción precisa de las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas a nivel atómico, permitiendo la derivación de parámetros magnéticos fundamentales para modelos de espines, cuantificados rigurosamente mediante el formalismo de Liechtenstein ( $J$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $K$ ). Asimismo, se emplearán simulaciones de Monte Carlo con *Simulated Annealing* para explorar de manera eficiente el complejo paisaje de fases magnéticas y asegurar la identificación de estados fundamentales y metaestables que contengan skyrmiones bajo diversas condiciones de temperatura y campo magnético. Complementando estos métodos, se utilizará Inteligencia Artificial con Redes Neuronales Vision Transformer (ViT) para la identificación y clasificación avanzada y eficiente de las texturas de espín topológicas generadas. El uso de transformadores permitirá superar las limitaciones de los métodos de clasificación manual o tradicionales, distinguiendo una mayor variedad y complejidad de fases topológicas, incluidas fases intermedias, antiskyrmiones y merones, de forma automatizada y precisa. Esta integración de IA con métodos físico-computacionales es una contribución metodológica valiosa que acelerará significativamente el proceso de caracterización y descubrimiento de materiales.

A nivel institucional y nacional para el Perú, este proyecto posiciona a la Universidad Nacional Mayor de San Marcos (UNMSM) y a su Grupo de Métodos Computacionales Aplicados a Nanomateriales (GMCAN) a la vanguardia de la investigación en física computacional y ciencia de materiales de frontera, áreas estratégicas a nivel global y cruciales para Fomenta el fortalecimiento de las capacidades del Laboratorio de Modelamiento y Simulación Computacional (LMSC) de la UNMSM, aprovechando y maximizando el uso de su infraestructura y software existente, y justificando la inversión en la potencial adquisición de equipo de computación de alto rendimiento (HPC) necesario para este tipo de cálculos avanzados. Además, impulsa la formación de profesionales altamente calificados en simulación computacional avanzada, ciencia de materiales con énfasis en magnetismo topológico e inteligencia artificial, perfiles escasos en el país y de alta demanda, contribuyendo a la construcción de una masa crítica de investigadores. Al generar conocimiento fundamental sobre materiales con propiedades magnéticas avanzadas y desarrollar metodologías innovadoras para su descubrimiento y caracterización, esta tesis contribuye directamente a la capacidad del país para participar en la economía del conocimiento y reducir la dependencia tecnológica. El dominio de estas técnicas es vital para el desarrollo sostenible y competitivo del Perú en áreas estratégicas como la electró-

nica avanzada, la computación y las energías. Finalmente, el proyecto se enmarca dentro de un esfuerzo multidisciplinario que busca consolidar una red de colaboración científica nacional e internacional, promoviendo el intercambio de conocimientos y la creación de sinergias que beneficien a la comunidad científica peruana. En resumen, esta investigación no solo aborda un problema científico y tecnológico de vanguardia a nivel internacional, sino que también genera un impacto directo y positivo en la capacidad científica de la UNMSM y contribuye al desarrollo de capital humano e infraestructura tecnológica en el Perú, elementos clave para el progreso y la competitividad del país.

## 2.7 Objetivos de la Investigación

### 2.7.1 *Objetivo General*

El objetivo general de la presente tesis es desarrollar y aplicar una metodología computacional avanzada que integre simulaciones de Monte Carlo y técnicas de Inteligencia Artificial (específicamente redes neuronales Vision Transformer), utilizando parámetros magnéticos ( $J, D, K$ ) derivados de cálculos de primeros principios (DFT), con el fin de identificar y clasificar eficientemente fases magnéticas topológicas estables (como skyrmiones y bimerones) en materiales bidimensionales tipo tri-haluros metálicos  $MCl_3$  ( $M = V, Cr$ ). Se buscará, además, investigar sistemáticamente el impacto del dopaje con impurezas magnéticas (Fe, Mn) en las propiedades de estas texturas (incluyendo su helicidad y número topológico) y su potencial para aplicaciones en espintrónica, particularmente en fenómenos de transporte como el efecto Hall topológico.

### 2.7.2 *Objetivos Específicos*

Los objetivos específicos de la presente investigación son los siguientes:

1. **Explorar la emergencia de fases magnéticas topológicas mediante simulaciones de Monte Carlo basadas en parámetros magnéticos derivados de DFT.** Para ello, se utilizarán parámetros de intercambio de Heisenberg ( $J$ ), interacción Dzyaloshinskii-Moriya ( $D$ ) y anisotropía magnetocristalina ( $K$ ), obtenidos a partir de cálculos de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) para materiales bidimensionales (2D) centrosimétricos, como los compuestos  $MX_3$  puros y dopados, con el fin de construir un Hamiltoniano de espín clásico. A partir de este modelo, se generará un conjunto de datos representativo de configuraciones de espines mediante simulaciones Monte Carlo-Metrópolis, abarcando un amplio rango de temperaturas



( $T$ ) y campos magnéticos ( $B$ ), de modo que se incluyan diversas fases magnéticas, tales como skyrmiones, antiskyrmiones, bimerones, merones y estados espirales.

2. **Desarrollar y optimizar una red neuronal Vision Transformer (ViT) para la clasificación automática de fases magnéticas topológicas.** Se diseñará, entrenará y optimizará una arquitectura de red neuronal basada en Vision Transformers utilizando como insumo el conjunto de configuraciones de espín generado en el objetivo anterior. El modelo ViT será capacitado para identificar y clasificar automáticamente los patrones morfológicos asociados a las distintas fases magnéticas topológicas como skyrmiones, antiskyrmiones, bimerones, entre otros a partir de representaciones bidimensionales de configuraciones de espín.
3. **Validar y caracterizar el rendimiento del modelo ViT y correlacionar las fases predichas con propiedades topológicas y efectos de dopamiento.** Se evaluará la precisión, robustez y capacidad de generalización del modelo entrenado mediante su aplicación a conjuntos de configuraciones de espín no utilizados durante el entrenamiento, incluyendo aquellos obtenidos de simulaciones de materiales dopados. Asimismo, se correlacionarán las clasificaciones proporcionadas por el modelo con propiedades físicas clave, tales como la helicidad de las texturas magnéticas (Bloch o Néel) y el número topológico  $Q$ , con el fin de validar la correcta identificación de las fases topológicas y comprender cómo influyen los parámetros  $J, D, K$  y por ende el dopaje en la estabilidad y características de los skyrmiones.

## 2.8 Hipótesis

La integración sinérgica de simulaciones de Monte Carlo, que emplean parámetros magnéticos ( $J, D, K$ ) derivados de cálculos de primeros principios (DFT), y redes neuronales Vision Transformer (ViT) para la clasificación automatizada de fases magnéticas, permitirá acelerar significativamente el descubrimiento y la caracterización de fases topológicas estables, tales como skyrmiones, bimerones y merones, en materiales bidimensionales tipo tri-haluros metálicos  $MCl_3$  ( $M = V, Cr$ ) puros y dopados. Este enfoque optimizará el análisis y la identificación de patrones complejos en las configuraciones de espín generadas a gran escala, superando las limitaciones de tiempo y esfuerzo inherentes a la caracterización manual o menos automatizada.

### III. Metodología

#### 3.1 Tipo y diseño de investigación

La presente investigación se clasifica como de tipo **básica-aplicada** con un componente significativo de **desarrollo experimental**.

Se considera *básica* debido a que busca la obtención de nuevos conocimientos sobre los fundamentos de fenómenos observables, específicamente en lo concerniente a la emergencia, estabilidad y manipulación de skyrmiones magnéticos en materiales bidimensionales. Esto incluye la exploración de los mecanismos subyacentes que rigen la interacción Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) en sistemas centrosimétricos, la relación entre la composición material y la helicidad de las texturas de espín, y la influencia de dopajes en las propiedades intrínsecas de estos materiales. Este enfoque se alinea con la definición de investigación básica al priorizar la comprensión fundamental sin una aplicación inmediata predeterminada.

Simultáneamente, la investigación es de tipo *aplicada* ya que persigue un propósito específico práctico: la aceleración del descubrimiento y la identificación de materiales con propiedades magnéticas optimizadas, prometedores para su utilización en tecnologías espintrónicas de próxima generación, tales como memorias de alta densidad y bajo consumo energético. El objetivo de diseñar y encontrar materiales con características mejoradas para una aplicación concreta la inscribe dentro de la investigación aplicada.

Finalmente, incluye un componente sustancial de **desarrollo experimental**. Este se manifiesta en el diseño, la implementación y la validación de nuevas metodologías computacionales. Particularmente, se centra en la creación y optimización de arquitecturas de redes neuronales Vision Transformer (ViT) para la clasificación automática y precisa de fases magnéticas topológicas. Este desarrollo sistemático se basa en los conocimientos adquiridos a través de la investigación (cálculos DFT y simulaciones de Monte Carlo) y se orienta a mejorar los procesos de caracterización de materiales a gran escala, lo cual representa una mejora sustancial de procesos existentes en el campo de la ciencia de materiales computacional.

### 3.2 Unidad de Análisis

Las unidades de análisis de la presente investigación son los **materiales bidimensionales (2D) tri-haluros metálicos ( $MCl_3$ )** y las **configuraciones de espín resultantes** que estos presentan. El estudio se centra específicamente en monocapas de  $VCl_3$  y  $CrCl_3$  tanto en su estado puro como en variantes dopadas con diversas impurezas magnéticas, como Fe, Mn, Cr y V, explorando un rango de concentraciones y posiciones de estos dopantes para comprender su impacto. Adicionalmente, se analizarán las propiedades intrínsecas de estos sistemas, incluyendo su estabilidad estructural, propiedades electrónicas (como la estructura de bandas y la densidad de estados), y crucialmente, sus propiedades magnéticas, que abarcan los parámetros de intercambio de Heisenberg ( $J_{ij}$ ), la interacción Dzyaloshinskii-Moriya ( $D_{ij}$ ) y la anisotropía magnetocristalina ( $K$ ). Finalmente, una unidad de análisis fundamental serán las diversas fases magnéticas topológicas que emergen en estos materiales, tales como skyrmiones, antiskyrmiones, merones, bimerones y fases espirales, las cuales se investigarán bajo distintas condiciones de temperatura y campo magnético para comprender su formación y estabilidad.

### 3.3 Población o Universo de Estudio

La población o universo de estudio de esta investigación abarca la **totalidad de materiales bidimensionales (2D) derivados de tri-haluros metálicos ( $MCl_3$ ) y sus configuraciones dopadas que son susceptibles de albergar skyrmiones magnéticos estables**. Este universo, de naturaleza **teórica y computacional**, engloba un vasto conjunto de posibles composiciones y estructuras que, si bien aún no han sido exploradas o sintetizadas experimentalmente, son el foco de esta investigación. Las conclusiones obtenidas a partir de este estudio serán directamente aplicables y válidas para esta clase específica de materiales, proporcionando pautas y criterios esenciales para el diseño y la identificación racional de nuevos compuestos con propiedades magnéticas deseadas, crucial para el avance en el campo de las tecnologías espintrónicas.

### 3.4 Tamaño de Muestra

En el contexto de esta investigación de naturaleza computacional y teórica, el concepto de “tamaño de muestra” se refiere a la **cantidad y diversidad de los sistemas modelados computacionalmente** y a los **conjuntos de datos generados** que sirven para el entrenamiento, validación y prueba de los modelos de Inteligencia Artificial.

La muestra en el presente estudio comprenderá:

- **Un conjunto representativo de configuraciones de materiales  $\text{MCl}_3$  puros y dopados.** La selección de estas configuraciones se basará en su viabilidad computacional y su capacidad para abarcar una diversidad de propiedades estructurales y magnéticas relevantes. Dichas propiedades serán obtenidas a través de cálculos de primeros principios (DFT/DFT+U) y el formalismo de Liechtenstein, asegurando un análisis exhaustivo.
- **Conjuntos de datos sintéticos de configuraciones de espín (mapas 2D).** Estos serán generados mediante simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis, abarcando un amplio rango de temperaturas, campos magnéticos y parámetros magnéticos de entrada. La muestra incluirá tanto fases magnéticas topológicas (como skyrmiones y merones) como no topológicas, constituyendo el corpus de datos esencial para el entrenamiento y la validación de la arquitectura Vision Transformer.

El tamaño definitivo de estos conjuntos de datos se determinará procurando un **equilibrio óptimo entre la exhaustividad científica y los recursos computacionales disponibles**. Esto garantizará la representatividad estadística necesaria para la confiabilidad y la capacidad de generalización de los modelos de Inteligencia Artificial desarrollados.

### 3.5 Técnicas de Recolección de Datos

Las **técnicas de recolección de datos** en la presente investigación, de naturaleza eminentemente computacional, refieren a los métodos sistemáticos y las herramientas informáticas empleados para la generación, procesamiento y obtención de la información digital indispensable para el análisis y la consecución de los objetivos propuestos.

Inicialmente, se emplearán **Cálculos de Primeros Principios (DFT/DFT+U)** utilizando softwares especializados como *Quantum ESPRESSO* y *SIESTA*, con la consideración de *VASP* para casos de alta demanda computacional. De estos cálculos se derivarán datos fundamentales, incluyendo parámetros estructurales optimizados (constantes de red, posiciones atómicas), energías de formación y cohesivas, así como propiedades electrónicas detalladas, tales como estructuras de bandas y densidades de estados (DOS, PDOS).

Posteriormente, para el **Cálculo de Interacciones Magnéticas**, se hará uso de códigos especializados que implementan el formalismo de Liechtenstein (por ejemplo, *SPR-KKR* o módulos integrados en otros paquetes DFT). Esta técnica permitirá extraer las magnitudes y características de las interacciones magnéticas interatómicas, específicamente las constantes de intercambio de Heisenberg ( $J_{ij}$ ), los vectores de la interacción Dzyaloshinskii-Moriya ( $\mathbf{D}_{ij}$ ) y los parámetros de anisotropía magnetocristalina ( $K$ ).

Las **Simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis** se llevarán a cabo con software como *VAMPIRE* o herramientas análogas e simulación de modelo de espín atomístico. A través de estas simulaciones, se generarán configuraciones de espín en equilibrio térmico para un amplio rango de temperaturas y campos magnéticos, facilitando la construcción de diagramas de fase magnética ( $B$ - $T$ ). Adicionalmente, se obtendrán métricas cuantitativas esenciales para la identificación de fases topológicas, como el número topológico  $Q$  y perfiles de magnetización.

La **Generación de Conjuntos de Datos para Aprendizaje Automático** constituye un paso crítico. Los mapas de espín resultantes de las simulaciones de Monte Carlo serán procesados y empleados como datos de entrada para el entrenamiento de la arquitectura *Vision Transformer* (ViT). Las etiquetas correspondientes a las fases magnéticas, determinadas mediante criterios físicos y topológicos, se utilizarán como los datos de salida para la clasificación.

Finalmente, el **Análisis de Datos y la Aplicación de Modelos de Inteligencia Artificial** se ejecutarán con el soporte de bibliotecas de programación en Python, tales como *TensorFlow* o *PyTorch* para el desarrollo del ViT, *NumPy* para la manipulación matricial, *Pandas* para la gestión de datos, y *Matplotlib* o *SciPy* para la visualización y el análisis estadístico. Los resultados de estas etapas incluirán predicciones automatizadas de propiedades magnéticas, clasificaciones automáticas de fases magnéticas y análisis de correlaciones entre la composición del material (dopaje) y las propiedades de las texturas de espín topológicas.

### 3.5.1 Localización

La presente investigación, de naturaleza eminentemente computacional y teórica, será desarrollada en su totalidad dentro de las instalaciones de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos (**UNMSM**). Específicamente, todas las actividades de generación de datos mediante simulaciones computacionales, así como el procesamiento y análisis subsiguiente de la información, se llevarán a cabo en los equipos de cómputo de alto rendimiento (**HPC**) del Laboratorio de Modelamiento y Simulación Computacional (**LMSC**), adscrito a la Facultad de Ciencias Físicas, en la ciudad de Lima, Perú.

## 3.6 Análisis e Interpretación de la Información

El análisis y la interpretación de la vasta información generada en esta investigación se abordarán mediante un **enfoque multi-escalar e integrado**, combinando rigurosamente los principios de la física computacional con técnicas avanzadas de la ciencia de datos.

En primera instancia, se realizará un **análisis de los datos obtenidos de los Cálculos de Primeros Principios (DFT/DFT+U y Formalismo de Liechtenstein)**. Los datos estructurales, tales como parámetros de red y coordenadas atómicas optimizadas, junto con las energías de formación y cohesivas, serán analizados para evaluar la estabilidad termodinámica y la viabilidad estructural de los sistemas  $\text{MCl}_3$  puros y dopados. Las estructuras de bandas electrónicas y las densidades de estados (DOS y PDOS) serán interpretadas para comprender las propiedades electrónicas fundamentales, incluyendo el carácter metálico, semiconductor o aislante, y para dilucidar las contribuciones específicas de los orbitales atómicos y los dopantes a la electronicidad del material. Adicionalmente, los parámetros magnéticos fundamentales ( $J_{ij}$ ,  $\mathbf{D}_{ij}$ ,  $K$ ) derivados del formalismo de Liechtenstein se analizarán sistemáticamente en función del tipo y la concentración del dopaje, así como de las distancias y geometrías interatómicas. Este análisis permitirá dilucidar las correlaciones entre la composición atómica, la estructura cristalina y la emergencia o modificación de las interacciones magnéticas clave, particularmente la interacción de Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) y la anisotropía magnetocristalina.

Posteriormente, se procederá con el **análisis de los datos provenientes de las Simulaciones de Monte Carlo**. Las configuraciones de espín resultantes de las simulaciones Monte Carlo-Metrópolis serán examinadas tanto visualmente como a través del cálculo de magnitudes físicas pertinentes (e.g., magnetización total, funciones de correlación de espín, helicidad local), para la identificación precisa de las diversas fases magnéticas (ferromagnética, antiferromagnética, espiral, paramagnética, etc.). Se calculará el número topológico ( $Q$ ) de las texturas de espín localizadas para confirmar de manera inequívoca la presencia y la estabilidad de skyrmiones, antiskyrmiones, merones y otras fases topológicas. La construcción y el estudio de los diagramas de fase Campo-Temperatura ( $B$ - $T$ ) permitirán mapear las regiones de estabilidad de las distintas fases magnéticas, identificando las condiciones óptimas para la formación y manipulación de texturas de espín topológicas, y se interpretará la influencia del dopaje en la topología y extensión de estas regiones de fase.

En lo que respecta al **Análisis y Evaluación de Modelos de Inteligencia Artificial**, se evaluará la efectividad de la arquitectura Vision Transformer (ViT) para la clasificación de fases mediante métricas de clasificación como la precisión, el **recall**, la puntuación  $F_1$  y la matriz de confusión. Se analizará la robustez del modelo ante variaciones en las configuraciones de espín y su capacidad de generalización, buscando interpretar cómo el mecanismo de auto-atención del transformador identifica características morfológicas clave de las texturas para lograr una clasificación precisa.

Finalmente, se realizará una **interpretación integrada y correlación de resultados**. Se establecerán correlaciones exhaustivas entre las propiedades a microescala (derivadas de DFT), las interacciones magnéticas (del formalismo de Liechtenstein), las fases topológicas emergentes (de Monte Carlo) y los resultados obtenidos de los modelos de

Inteligencia Artificial. Se interpretará de forma crítica cómo el tipo, concentración y posición de los dopantes influyen en la estabilidad de los skyrmiones, su tamaño nanométrico, su helicidad (Bloch o Néel) y su impacto potencial en fenómenos de transporte, como el efecto Hall topológico. Esta síntesis global de los hallazgos permitirá identificar y proponer materiales  $M\text{Cl}_3$  (puros o dopados) que exhiban características prometedoras para aplicaciones en la próxima generación de dispositivos espintrónicos, proporcionando una base teórica y computacional sólida para guiar futuras investigaciones experimentales.

## IV. Presupuesto



## V. Cronograma

## VI. Bibliografía

- Araz, J. Y., Criado, J. C., & Spannowsky, M. (2022). Identifying magnetic antiskyrmions while they form with convolutional neural networks. *arXiv preprint arXiv:2205.11535*.
- Bogdanov, A. N., & Yablonskii, D. A. (1989). Thermodynamically stable "vortices" in magnetically ordered crystals. The mixed state of magnets. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, 95, 178-182.
- Borisov, V. (2023). From electronic structure to magnetism and skyrmions (Topical review). *arXiv preprint arXiv:2310.08628*.
- Dutta, S., Varma U, S., Bandyopadhyay, P., & Banerjee, R. (2023). A Study of Electronic and Magnetic Properties of Transition Metal Trihalides. *arXiv preprint arXiv:2307.00693*.
- Iroulart, E., Gómez Albarracín, F. A., & Rosales, H. D. (2024). Probing Random-Bond Disorder Effects on Ferromagnetic Skyrmion Arrays. *arXiv preprint arXiv:2407.00159*.
- Kara, O., Sehanobish, A., & Corzo, H. H. (2021). Fine-tuning Vision Transformers for the Prediction of State Variables in Ising Models. *Fourth Workshop on Machine Learning and the Physical Sciences (NeurIPS 2021)*.
- Plummer, D. Z., D'Alessandro, E., Burrowes, A., Fleischer, J., Heard, A. M., & Wu, Y. (2024). 2D Spintronics for Neuromorphic Computing with Scalability and Energy Efficiency. *MDPI*, 15(2), 16.
- Tran, H. B., & Matsushita, Y.-i. (2024). Skyrmions in van der Waals centrosymmetric materials with Dzyaloshinskii-Moriya interactions. *Scripta Materialia*, 239, 115799.
- Vaswani, A., Shazeer, N., Parmar, N., Uszkoreit, J., Jones, L., Gomez, A. N., Kaiser, Ł., & Polosukhin, I. (2017). Attention is All You Need [Introducción de la arquitectura Transformer y el mecanismo de auto-atención]. *Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, 6000-6010. <https://papers.nips.cc/paper/2017/file/3f5ee243547dee91fbd053c1c4a845aa-Paper.pdf>

## **VII. Anexos**