

## **1 Información General**

Grupo de investigación : GRUPO DE MÉTODOS COMPUTACIONALES APLICADO A NANOMATERIALES

Línea de Investigación : Aplicaciones de la Física en Nanociencia y Nanotecnología de Materiales Magnéticos

Área temática de la investigación : Tecnología de Materiales

Objetivos ODS : Garantizar el acceso a una energía asequible, fiable, sostenible y moderna para todos

Línea de investigación OCDE : Física de la Materia

Localización : En las sedes de la UNMSM en Lima

## **2 Responsable del proyecto**

Nombres y apellidos: CHACHI ROJAS AYALA

Carta de compromiso de confidencialidad; **ok**

## 4 Descripción del proyecto

### Título de la Propuesta :

Estudio de las propiedades electrónicas y magnéticas topológicas de tri-haluros metálicos  $MCl_3$  ( $M = V, Cr$ ) con impurezas metálicas (Fe, Mn, Cr, V) para aplicaciones en espintrónica

### Resumen ejecutivo <max. 1000 palabras.>

Estructuras magnéticas topológicas, llamados skyrmiones, son vórtices magnéticos muy prometedores como portadores de información en futuros dispositivos espintrónicos, como por ejemplo, en memorias *racetrack*, memorias de gran densidad de información y bajo consumo energético, o en nuevos modelos de computación como la computación neuromórfica y la computación cuántica. Actualmente, el estudio de la formación de skyrmiones se ha orientado a magnetos bidimensionales y magnetos de van der Waals o haluros metálicos debido a que en estos tipos de materiales los skyrmiones pueden alcanzar dimensiones de apenas unas constantes de red y generar una polarización eléctrica inducida por los skyrmiones, lo que permitirá nuevas posibilidades para controlar y detectar skyrmiones. Además, algunos de estos materiales son libres de tierras raras.

Por el momento, el estudio de skyrmiones en magnetos van der Waals se ha limitado a materiales de algunas familias de compuestos intermetálicos basados en Gd, como  $Gd_2PdSi_3$ , y haluros metálicos  $NiBr_2$ ,  $CoI_2$ ,  $CrI_3$ . Estos materiales han mostrado órdenes helicoidales precursores de los skyrmiones, sin embargo, solo en algunos de estos materiales se ha logrado estabilizar redes de skyrmiones. Esto debido a las interacciones que suprimen la aparición de los skyrmiones. Es por ello que un estudio más detallado de las interacciones que aparecen en estos materiales es necesario para entender los mecanismos de estabilización de los skyrmions. En estos materiales se ha mostrado que los skyrmiones poseen mayores grados de libertad como la helicidad, esto permitiría un mayor control sobre las propiedades únicamente alterando las interacciones presentes en el material. Por ejemplo, en los tri-haluros  $CrCl_3$  y  $VCl_3$  se observó que las helicidades de los skyrmiones tienen sentidos opuestos, siendo responsable el elemento metálico. Otro ejemplo es el compuesto  $FeCl_3$  donde la presencia de Fe origina la aparición de skyrmiones antiferromagnéticos, los cuales son los tipos de skyrmiones más adecuados para memorias *racetrack*.

En el presente trabajo se estudiará el efecto de las impurezas magnéticas (Fe, Mn, Cr, V) en materiales tri-haluros  $MCl_3$  ( $M = Cr, Fe, V$ ) sobre las propiedades topológicas de los skyrmiones, como la helicidad. Se buscará conocer la relación entre la concentración y naturaleza de estas impurezas sobre la helicidad de los skyrmiones y fenómenos relacionados como el efecto de Hall topológico.

El estudio iniciará con la determinación del estado fundamental del sistema  $MCl_3$  con impurezas magnéticas mediante cálculos autoconsistentes y optimización estructural basados en la Teoría Funcional de la Densidad (DFT). Para la descripción de las propiedades electrónicas del sistema será usado la corrección de Hubbard para el término de correlación electrónica en el hamiltoniano del sistema, enfoque denominado DFT+U. Estos resultados serán usados para calcular la constante de intercambio, el vector de Dzyaloshinskii-Moriya y la anisotropía magnetocristalina mediante el formalismo de Liechtenstein. Estos parámetros serán utilizados para la simulación de las fases magnéticas topológicas. Diagramas de fases magnéticas B-T (donde B es el campo magnético aplicado y T la temperatura) serán determinados mediante simulaciones Monte Carlo-Metropolis, usando un hamiltoniano clásico efectivo de Heisenberg, con la finalidad de clasificar y estudiar el efecto de B y T y las impurezas metálicas sobre las fases magnéticas topológicas. Adicionalmente, será usado un modelo de *Deep Learning* para mejorar la identificación de los estados magnéticos topológicos tales como: skyrmions, anti-skyrmions, bimeron, helical. Para ello, se usarán las configuraciones finales obtenidas de las simulaciones de Monte Carlo-Metropolis. Cálculos de curvas de histéresis magnética y tight binding serán realizados de manera complementaria, para una mejor comprensión de los efectos

físicos de los átomos dopantes (Fe, Mn, Cr, V) sobre el sistema  $\text{MCl}_3$ , y también observar el efecto sobre otras magnitudes físicas como la resistividad de Hall.

Se espera encontrar un umbral de concentración de impurezas metálicas sobre el sistema  $\text{MCl}_3$ , en la cual los efectos sobre la helicidad sea un control determinista de su orientación hasta poder invertirse totalmente. Asimismo, se espera obtener estados topológicos magnéticos con diferentes tipos de helicidad, donde coexistan diferentes tipos de estructuras topológicas magnéticas similares a la de los skyrmions. Adicionalmente, se espera observar una dependencia de las propiedades de transporte electrónico como el efecto Hall Topológico con la concentración de los dopantes.

**Palabras Claves:**

Skyrmions, tri-haluros metálicos, DFT, Monte Carlo, Deep Learning,

**Estado del arte o antecedentes :** <max. 20000 palabras.>

La creciente demanda de la tecnología actual por un eficiente almacenamiento y manipulación de la información enfrenta múltiples dificultades, entre ellas, su imposibilidad de continuar cumpliendo con la ley de Moore, debido a que los dispositivos han alcanzado dimensiones atómicas, donde el comportamiento de los materiales cambia drásticamente y la información tal como se almacena se vuelve volátil [1]. Esto propició nuevas áreas de investigación como la espintrónica donde nuevas propuestas han surgido con el propósito de superar los límites físicos del almacenamiento de información [1].

Dentro de la espintrónica aparecieron subramas de investigación, entre ellas la skyrmiónica [2]. La skyrmiónica estudia un tipo de materia topológica, las texturas topológicas de espín en materiales magnéticos. Los skyrmiones magnéticos fueron predichos en 1989 por Bogdanov y colaboradores [3,4] en magnetos uniaxiales, estos tenían un precedente conceptual en el trabajo de T. Skyrme [5] quien sentó las bases de la descripción matemática de los skyrmiones. Experimentalmente fueron observados por primera vez en 2009, usando difracción de neutrones, por Muehlbauer y colaboradores [6] a nivel de *bulk* en el compuesto  $\text{MnSi}$ . Ellos observaron una fase magnética compuesta por tubos de skyrmiones ordenados hexagonalmente. En el mismo trabajo, se explicó la estabilidad de esta fase usando la teoría de campo medio de Landau-Ginzburg [6]. Ese mismo año, se propuso un modelo microscópico efectivo que mediante simulaciones de Monte Carlo demostró las características de las fases observadas en el  $\text{MnSi}$ , demostrando que los modelos efectivos de espín pueden ser usados para capturar todas las características de este tipo de magnetos como el  $\text{MnSi}$ , llamados magnetos quirales [7]. En 2010 se observó los skyrmiones en espacio real usando microscopía electrónica de transmisión (TEM) e igualmente se pudo capturar todo el comportamiento del sistema magneto topológico usando un modelo efectivo y simulaciones de Monte Carlo [8]. Esto mostró que en sistemas bidimensionales el área de existencia de los skyrmiones, visto en un diagrama B-T, es más grande que en sistemas tridimensionales, es decir, usando la dimensionalidad se puede controlar la estabilidad de estas estructuras magnéticas, skyrmiones [8].

Fue así que desde el año 2009 la investigación se centró en el estudio de materiales magnéticos no-centrosimétricos, donde la principal interacción responsable de la formación de los skyrmiones era la interacción de Dzyaloshinskii-Moriya, sin embargo, en estos materiales muchas de las propiedades de los skyrmiones necesarias para aplicaciones, no son compatibles o presentes simultáneamente, por ejemplo, la estabilización de skyrmiones a altas temperaturas solo se consigue para skyrmiones de radios demasiado grandes. Skyrmiones con radio de algunas constantes de red se consiguen únicamente a bajas temperaturas [2].

Por consiguiente, la búsqueda de skyrmiones con radios más pequeños a altas temperaturas se orientó a otros tipos de materiales magnéticos, los magnetos frustrados. En estos materiales, la frustración magnética estimulaba la aparición de skyrmiones magnéticos, como resultado son más pequeños, y habría la posibilidad de controlar algunas de las

propiedades como la helicidad (el sentido de giro de los momentos), que en materiales no-centrosimétricos eran fijas. La búsqueda comenzó con el compuesto intermetálico  $\text{Gd}_2\text{PdSi}_3$ , donde se detectó presencia de skyrmiones por efecto topológico gigante [2]. Más tarde, se encontraría evidencia de estados modulados (estados precursores de skyrmiones) en di-haluros como  $\text{NiBr}_2$  y  $\text{CoI}_2$ . Estos últimos presentan una ventaja sobre los anteriores, no poseen tierras raras en su composición, lo que favorece la escalabilidad de cualquier dispositivo espintrónico elaborado a partir de ellos [2].

Recientemente, en un trabajo de Tran y Matsushita [9], mediante cálculos de DFT y Monte Carlo, se observó que los tri-haluros metálicos del tipo  $\text{MCl}_3$  (donde  $\text{M} = \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}$ ) podrían albergar skyrmiones magnéticos. Los autores observaron que la helicidad cambia entre dos extremos, de anti-horario a horario, cuando el átomo metálico es reemplazado, por ejemplo sustituyendo Cr por V. Este efecto nos muestra que reemplazar los átomos magnéticos de un magneto por otro podría permitir controlar la helicidad de los skyrmiones en estos materiales tri-haluros metálicos.

En un trabajo del año 2020, Lei y colaboradores [12] mostraron como el dopamiento magnético con V y Mn en un monolayer de  $\text{CrX}_2$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}$ ) modifica sus propiedades electrónicas de manera conveniente para favorecer su uso en dispositivos valleytrónicos. Este trabajo prueba que el dopamiento magnético con V y Mn de materiales bidimensionales basados en Cr produce estructuras estables y modifica su estructura electrónica de manera favorable para aplicaciones tecnológicas.

Por lo tanto, es imperativo un estudio del efecto de las impurezas magnéticas en estos materiales tri-haluros metálicos  $\text{MCl}_3$  sobre las propiedades topológicas de los skyrmions, como la helicidad, con ello estudiar la estabilidad de estas estructuras magnéticas a altas temperaturas.

En el marco de un proyecto VRIP-UNMSM 2023 se estudió las propiedades de magnetos centrosimétricos de materiales bidimensionales. Se usó el modelo teórico de espín atómico de Heisenberg. Para la simulación fue usado el método de Monte Carlo-Metrópolis. Se determinó diagramas de número topológico ( $Q$ ) versus campo magnético ( $h$ ) a temperatura  $T = 0.01\text{kb}/J$ . Estos diagramas fueron realizados para las siguientes razones de  $J_2$  y  $J$ :  $0.5J_2/J$ ,  $0.6J_2/J$ ,  $0.7J_2/J$ . Se observó que el número skyrmiónico crece al aumentar la razón  $J_2/J$ , asimismo, podemos observar que la región del campo donde se pueden estabilizar los skyrmiones aumenta significativamente. Por tanto, el control de la razón  $J_2/J$  es el mecanismo probable para la estabilización de los skyrmiones. Adicionalmente, se realizaron cálculos complementarios de magnetización y energía para poner más en evidencia el papel clave de la razón  $J_2/J$  en la formación de los skyrmiones.

Recientemente, estudiamos fases magnéticas topológicas en un magneto bidimensional con red cristalina arquimediana,  $\text{CaVO}$ . En este estudio, se incluyó la interacción de Dzyaloshinskii-Moriya en el modelo teórico de espín clásico de Heisenberg. También fue usado el método de Monte Carlo-Metrópolis y el annealing simulado para calcular computacionalmente las propiedades magnéticas del sistema. Se identificaron fases magnéticas de la nueva red mediante un modelo de red convolucional. El modelo fue previamente entrenado con las configuraciones finales de la misma grilla para una red cuadrada, modelo largamente estudiado en la literatura. Se logró un diagrama de fases que respeta el comportamiento habitual brindándonos la regiones donde se estabilizan los skyrmiones. Este estudio fue presentado en un evento internacional, VIII NanoMat 2023, Brasil, en el que se obtuvo mención honorífica al trabajo presentado.

Actualmente, se viene trabajando en un estudio de las propiedades estructurales y electrónicas del sistema  $\text{FeCl}_3$ , mediante cálculos basados en la Teoría Funcional de la Densidad. Los resultados preliminares del estudio de las propiedades electrónicas y magnéticas del sistema  $\text{FeCl}_3$  muestran buen acuerdo con la literatura. La importancia de la corrección de Hubbard para los electrones de tipo d en general es mostrado en los gráficos de estructura de bandas, indicando que para valores mayores a  $U > 2 \text{ eV}$ , se podría esperar valores de los parámetros estructurales y electrónicos del  $\text{FeCl}_3$  más cercanos a los reportado en la literatura científica.

En el archivo adjunto se muestran mayores detalles de los resultados previos sobre los materiales propuestos y similares.

**Documento adjunto estado de arte** ( PDF +6mb)

**Planteamiento del problema :** <max. 2000 palabras.>

Desde el descubrimiento experimental de los skyrmiones en el año 2009, mucho esfuerzo ha sido dedicado en buscar materiales que puedan albergar estas estructuras topológicas magnéticas en condiciones adecuadas para potenciales aplicaciones en dispositivos espintrónicos [1]. Por ejemplo en memorias racetrack que prometen almacenar una alta densidad de información y bajo consumo energético, o en los dispositivos lógicos, como los transistores basados en skyrmiones, que prometen capacidades superiores en volumen de procesamiento de información a su contrapartes actuales. Sin embargo, muchos de los prototipos no poseen el rendimiento esperado, esto debido a que la primera familia de materiales en los que se encontró, los magnetos no-centrosimétricos, albergan skyrmiones que no presentan los requisitos necesarios [2]. Algunas de las características necesarias para la aplicación son; skyrmiones con radio de apenas unas constantes de red, skyrmiones estabilizados a altas temperaturas y sin campo magnético, manipulación de los skyrmiones mediante corrientes de espín polarizados con ausencia de la desviación de la trayectoria provocada por el efecto Hall skyrmiónico, y finalmente que los skyrmiones no sean tan susceptibles a los defectos superficiales [2]. Si bien en algunos materiales y heteroestructuras se ha conseguido la coexistencia de más de uno de los requerimientos mencionados, no se ha podido lograr aún que coexistan todos los requisitos en un solo material.

Por ello, desde el descubrimiento del magnetismo en materiales 2D como por ejemplo los magnetos de van der Waals, específicamente en tri-haluros, la atención se ha orientado a ellos [10]. Se sabe que las propiedades topológicas de los skyrmiones son dependientes de las interacciones internas del material, y estas interacciones dentro de los materiales tri-haluros pueden ser ajustadas de diversas formas. Por ejemplo, por exfoliación, la cual permitiría disminuir su dimensionalidad y por tanto afectar las interacciones internas, ya que dependen de las dimensiones del material. Otras formas son, por presión y finalmente sustitución química [2]. De esta manera el magnetismo en materiales tri-haluros es más controlable que en otros tipos de materiales. Sin embargo, la forma exacta del efecto de estas manipulaciones necesita ser explorada para cada tipo de haluros en particular.

Desde 2017, cuando se encontró evidencia de ferromagnetismo en las estructuras por capas de  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$  y  $\text{CrI}_3$ , se han buscado magnetos de van der Waals que alberguen skyrmiones y entender los mecanismos que permiten la existencia de tales fases magnéticas [10]. Esto se consiguió por primera vez en los compuestos  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$  y  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ . Recién en 2022 se observó skyrmiones magnéticos a temperatura ambiente en el compuesto  $\text{Fe}_5\text{GeTe}_2$  dopado con Co [10]. Si bien se ha observado la existencia de skyrmiones en algunos de estos materiales, también se ha observado que algunas propiedades de estos materiales podrían suprimir la formación de skyrmiónicas [2]. Por ejemplo, las modulaciones antiferromagnéticas debido a interacciones entre las capas, los skyrmiones requieren de modulaciones ferromagnéticas para existir [2]. Otro efecto, la insuficiente intensidad de la polarización eléctrica inducida por los skyrmiones, aún cuando la presencia de polarización eléctrica inducida magnéticamente es muy prometedor, ya que permitirá interactuar con los skyrmiones eléctricamente, se debe tener en cuenta que para aplicaciones se requiere que estas sean más intensas que las actualmente encontradas y estables a altas temperaturas.

Además, los modelos teóricos [2] predicen que los skyrmiones en materiales tri-haluros poseen un mayor número de grados de libertad, tal como la helicidad, la cual no está estrictamente fija en estos tipos de sistemas algo que sí sucede en la familia de materiales no-centrosimétricos. Existen predicciones teóricas que indican que la helicidad no fija permitiría la presencia de diferentes estructuras simultáneamente, lo que afectaría notablemente las propiedades dinámicas, esto plantea un comportamiento dinámico totalmente nuevo de las estructuras magnéticas, escenario que

no ha sido estudiado a profundidad. Los grados de libertad adicionales de los skyrmiones en los tri-haluros plantea nuevos escenarios, no previamente observados en magnetos no-centrosimétricos, por lo que su efecto sobre la idoneidad de los materiales para aplicaciones tecnológicas aún no es claro.

En los magnetos tri-haluros del tipo  $\text{MCl}_3$  las propiedades pueden ser ajustadas a través de la reducción de capas, presión sobre la red cristalina o sustitución química (dopamiento), en ese sentido, el presente estudio pretende responder a la interrogante: ¿Cuál es el efecto de perturbar la estructura electrónica mediante dopamiento de los magnetos tri-haluros  $\text{MCl}_3$  sobre las fases magnéticas topológicas? Asimismo, preguntarnos ¿Qué regiones en los diagramas de fase termodinámicos, campo versus temperatura, ocupan las fases magnéticas identificadas y estables?.

**Justificación:** <max. 2000 palabras>

El surgimiento de los materiales bidimensionales, en 2004, cambió el panorama de la física de materia condensada. Esto provocó la búsqueda de diversos fenómenos físicos en estos sistemas bidimensionales, como el magnetismo. La búsqueda dió resultados recién el año 2017 donde se observó un orden ferromagnético de largo alcance en materiales bidimensionales de tipo van der Waals, compuestos  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$  y  $\text{CrI}_3$ , los cuales poseían estructuras de capas [10]. La existencia de un orden ferromagnético de largo alcance hace prever la existencia de estructuras magnéticas topológicas como los skyrmiones debido a que son excitaciones naturales del orden ferromagnético. Por lo que es relevante explorar la posibilidad de la estabilización de skyrmiones magnéticos en estos materiales.

En 2019 se observó por primera vez los skyrmiones magnéticos en esta clase de materiales, específicamente en los compuestos  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$  y  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ . Recién en 2022 se logró observar skyrmiones magnéticos a temperatura ambiente en estos materiales, en el compuesto  $\text{Fe}_5\text{GeTe}_2$  dopado con 50% de Co [10]. Por tanto, la búsqueda de los skyrmiones en los materiales de van der Waals bidimensionales no sólo es relevante sino que es de vanguardia, lo cual expandirá las fronteras de la física del magnetismo.

Por otro lado, los skyrmiones encontrados en los magnetos de van der Waals poseen propiedades muy particulares debido a la ausencia de la interacción Dzyaloshinskii-Moriya en primeros vecinos. Esta interacción era usualmente la interacción responsable de la estabilización de los skyrmiones magnéticos y, además, esta interacción definía el tipo de skyrmión. En ausencia de esta interacción los mecanismos restantes, como la interacciones ferromagnética, anti-ferromagnética, dipolar, o RKKY, no poseen la capacidad para seleccionar una helicidad bien definida y de esa forma fijar el tipo de skyrmion. Este efecto causa que puedan existir simultáneamente distintos tipos de skyrmiones y daría lugar a la exploración de redes conformadas por diversos tipos de skyrmiones originando nuevos fenómenos como resultado de la interacción entre estas estructuras [2]. Los modelos teóricos prevén que esto afectaría la dinámica de las estructuras magnéticas y las propiedades de transporte térmico del material [2]. Por lo que es necesario explorar el complejo comportamiento magnético de los skyrmiones en estos materiales.

Una característica favorable de los skyrmiones encontrados en los magnetos de van der Waals, como los tri-haluros, es que son muy pequeños [2] y se han encontrado a temperatura ambiente como en el compuesto  $\text{Fe}_5\text{GeTe}_2$  dopado con Co [10], cumpliendo algunas de las condiciones para implementar dispositivos espintrónicos basados en skyrmiones [2]. Otra nueva característica de estos materiales es que la formación de skyrmiones provoca la aparición de una polarización eléctrica, lo que abre una nueva posibilidad para controlar y detectar estructuras magnéticas mediante campos eléctricos [2,11]. Por ello, los skyrmiones en estos materiales tri-haluros metálicos poseen especial importancia desde el punto de vista de aplicaciones tecnológicas orientadas a espintrónica, dispositivos cuyas características teóricas prometen mayor almacenamiento de información y un menor consumo energético que sus contrapartes actuales [2,9].

**Contribución e impacto** : <max. 1500 palabras.>

1. Los resultados obtenidos contribuirán a un mayor conocimiento básico-científico sobre la formación de skyrmiones en materiales tri-haluros metálicos.
2. Diseño de nuevos materiales con potencial aplicación en dispositivos espintrónicos de mayor rendimiento que sus contrapartes actuales y que serán de menor consumo energético.
3. Desarrollo de nuevos modelos de *Deep Learning* que permitirán construir los diagramas de fase de materiales magnéticos, de manera más detallada que los métodos actuales, permitiendo reconocer mayor variedad de fases magnéticas.
4. El proyecto permitirá la capacitación de jóvenes investigadores (tesistas) en el uso de técnicas computacionales modernas para estudio de materiales. Por ende, formación de recursos humanos altamente calificados para atender la demanda de la sociedad.
5. La realización y culminación del proyecto permitirá la concretización de una red de colaboración de al menos tres grupos de investigación de la universidad y el exterior en torno a temas de interés común.

**Objetivos** : <max. 1500 palabras.>

**General :**

Estudiar el efecto de impurezas magnéticas Fe, Mn, Cr, y V sobre las fases magnéticas topológicas en materiales tri-haluros  $MCl_3$  ( $M = V, Cr$ ) buscando la relación entre la concentración y naturaleza de estas impurezas sobre la helicidad de los skyrmiones y fenómenos relacionados como el efecto de Hall topológico.

**Específicos :**

1. Estudiar la estabilidad estructural y propiedades electrónicas tales como: estructura de bandas y densidad de estados del sistema  $MCl_3$  ( $M = V$  y  $Cr$ ) dopado con átomos de Fe, Mn, Cr y V usando DFT.
2. Calcular las interacciones magnéticas de intercambio y de Dzyaloshinskii-Moriya del sistema  $MCl_3$  dopado usando el formalismo de Liechtenstein.
3. Estudiar el espacio de fase termodinámico de las estructuras magnéticas topológicas mediante simulaciones Monte Carlo - Metrópolis.
4. Mejorar la identificación de los estados topológicos magnéticos tales como: skyrmion, anti-skyrmion, bimeron, y spiral, usando modelos de *Deep Learning*.

**Metodología** : <max. 2000 palabras.> Falta

En este proyecto, se llevará a cabo el estudio de las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas del sistema

MCl<sub>3</sub> (M = V, Cr) dopado con átomos metálicos Fe, Mn, Cr y V. Este estudio se realizará mediante cálculos basados en la Teoría Funcional de la Densidad (DFT), Monte Carlo-Metrópolis y *Deep Learning*. En primer lugar, se realizarán cálculos de DFT utilizando los softwares Quantum ESPRESSO, VASP y SIESTA, ambos programas de código abierto desarrollados para realizar cálculos teóricos a nivel de la DFT. Con estos cálculos, se buscará optimizar estructuralmente el sistema MCl<sub>3</sub> tanto sin dopar como dopado. También se buscará validar las funcionales de intercambio y correlación, con las cuales, las propiedades electrónicas, estructurales y termodinámicas tengan una buena correlación con los resultados de la literatura. Para esto, se calculará la estructura de bandas electrónicas, la energía de formación y la energía de enlace del átomo dopante.

El análisis de las propiedades magnéticas se llevará a cabo mediante cálculos de DFT+U, donde se utiliza una corrección de Hubbard para obtener una mejor descripción de las propiedades electrónicas y magnéticas de sistemas fuertemente correlacionados. Posteriormente, se empleará el formalismo de Liechtenstein, implementado en el programa de código abierto TB2J, para calcular los valores de las constantes de intercambio (J), los vectores de Dzyaloshinskii-Moriya (D) y la anisotropía magnetocristalina (K).

Por otro lado, el estudio de los estados magnéticos topológicos en el sistema MCl<sub>3</sub> dopado se llevará a cabo mediante simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis, que incluirán un proceso de *simulated annealing* para encontrar estados excitados cercanos al estado fundamental. Se utilizará la estructura cristalina optimizada y las constantes de intercambio y los vectores de Dzyaloshinskii-Moriya previamente calculadas mediante cálculos DFT para construir el hamiltoniano efectivo de Heisenberg. Bajo esta metodología, se calcularán observables importantes del sistema, como la quiralidad, susceptibilidad magnética, factor de estructura estático, entre otros. Los observables medidos se utilizarán para construir los diagramas de fase B-T, donde B representa el valor del campo magnético aplicado al sistema, y T corresponde a la temperatura absoluta del sistema.

En la etapa final, las configuraciones resultantes del sistema, después del proceso de minimización mediante Monte Carlo Metrópolis, se emplearán para entrenar una red neuronal convolucional (CNN) con el propósito de identificar con mayor precisión las diversas texturas de espín topológico. Se emplearán al menos tres arquitecturas de red convolucional para evaluar su eficacia en la clasificación y la generación de diagramas de fase. Se compararán sus métricas, así como las matrices de confusión, con el objetivo de analizar y contrastar su rendimiento en este contexto. Este enfoque proporciona una ventaja sobre el método convencional de calcular el número skyrmiónico, ya que permite distinguir una mayor variedad de estados, incluyendo fases magnéticas topológicas intermedias y fases skyrmiónicas anti-ferromagnéticas que no son fácilmente distinguibles mediante el enfoque tradicional.

Bajo las metodologías mencionadas anteriormente, será posible investigar el impacto de la sustitución de un átomo magnético en el sistema tri-haluro MCl<sub>3</sub>, y cómo su concentración de impureza afecta las propiedades magnéticas topológicas de los skyrmions encontrados. Se explorarán características como la helicidad, el número topológico, así como propiedades de transporte y respuesta tales como: el efecto Hall topológico y la polarización eléctrica inducida.

Finalmente, cabe mencionar que todos los cálculos serán realizados en el Laboratorio de Modelamiento y Simulación Computacional (LMSC) de la Facultad de Ciencias Físicas - UNMSM, que cuenta con estaciones de trabajo necesarias para estos cálculos. Además, se propone en este proyecto adquirir un equipo HPC de mayor capacidad para dicho fin. Si fuera necesario, los cálculos más pesados que requieran de mayor capacidad computacional, serán usados los clusters Titanio y/o Carbono de la UFABC o el supercomputador Santos Dumont de la LNCC- Brasil, esto a través de nuestro colaborador externo de la UFABC.

Información con mayor detalle de todo el proceso (metodología) se presenta en el archivo adjunto.

**Documento adjunto de la metodología**  
**archivo adjunto**



## Referencias bibliográficas <max. 2500 palabras.>

- [1] B. Göbel, I. Mertig, and O. A. Tretiakov, “Beyond skyrmions: Review and perspectives of alternative magnetic quasiparticles,” *Phys Rep*, vol. 895, pp. 1–28, 2021, doi:10.1016/j.physrep.2020.10.001.
- [2] C. Back *et al.*, “The 2020 skyrmionics roadmap,” *J Phys D Appl Phys*, vol. 53, no. 36, p. 363001, Jun. 2020, doi:10.1088/1361-6463/ab8418.
- [3] A. Bogdanov and D. Yablonskiui, “Thermodynamically stable ‘vortices’ in magnetically ordered crystals. The mixed state of magnets,” *Sov. Phys. JETP*, vol. 68, p. 101, Jan. 1989, [Online]. Available: <http://www.jetp.ras.ru/cgi-bin/e/index/e/68/1/p101?a=list>
- [4] A. Bogdanov and A. Hubert, “Thermodynamically stable magnetic vortex states in magnetic crystals,” *J Magn Magn Mater*, vol. 138, no. 3, pp. 255–269, 1994, doi:10.1016/0304-8853(94)90046-9.
- [5] T. H. R. Skyrme, “A unified field theory of mesons and baryons,” *Nuclear Physics*, vol. 31, pp. 556–569, 1962, doi:10.1016/0029-5582(62)90775-7.
- [6] S. Mühlbauer *et al.*, “Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet,” *Science (1979)*, vol. 323, no. 5916, pp. 915–919, 2009, doi:10.1126/science.1166767.
- [7] S. Do Yi, S. Onoda, N. Nagaosa, and J. H. Han, “Skyrmions and anomalous Hall effect in a Dzyaloshinskii-Moriya spiral magnet”., *Phys. Rev. B*, vol. 80, no. 5, p. 54416, Aug. 2009, doi:10.1103/PhysRevB.80.054416.
- [8] Yu, X., Onose, Y., Kanazawa, N. et al. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal. *Nature* 465, 901–904, 2010, doi: 10.1038/nature09124.
- [9] H. B. Tran and Y. Matsushita, “Skyrmions in van der Waals centrosymmetric materials with Dzyaloshinskii–Moriya interactions,” *Scr Mater*, vol. 239, p. 115799, 2024, doi:10.1016/j.scriptamat.2023.115799.
- [10] X. Yao *et al.*, “Modulation of skyrmionic magnetic textures in two-dimensional vdW materials and their heterostructures,” *iScience*, vol. 26, no. 4, p. 106311, 2023, doi: <https://doi.org/10.1016/j.isci.2023.106311>
- [11] K. Huang, E. Schwartz, D.-F. Shao, A. A. Kovalev, and E. Y. Tsymbal, “Magnetic antiskyrmions in two-dimensional van der Waals magnets engineered by layer stacking,” *Phys Rev B*, vol. 109, no. 2, p. 24426, Jan. 2024, doi: 10.1103/PhysRevB.109.024426.
- [12] C. Lei, Y. Ma, T. Zhang, X. Xu, B. Huang, and Y. Dai, “Valley polarization in monolayer CrX<sub>2</sub> (X = S, Se) with magnetically doping and proximity coupling,” *New J Phys*, vol. 22, no. 3, 2020, doi: 10.1088/1367-2630/ab7256.

\*\*\*\*\*