

# Proyecto de Tesis de Maestría

Descubrimiento acelerado por IA de materiales 2D con Skyrmiones  
estables para aplicaciones espintrónicas

Mitchell Mirano Caro

Universidad Nacional Mayor de San Marcos  
Maestría en Física  
Mención en Estado Sólido

26 de junio de 2025



# Contenido

- 1 Motivación
- 2 Marco Conceptual
- 3 Justificación
- 4 Objetivos
- 5 Hipótesis
- 6 Metodología



# Motivación

- La búsqueda de materiales para espintrónica es lenta y costosa, lo que impulsa la necesidad de metodologías computacionales multiescala que aceleren el descubrimiento de materiales con skyrmiones estables y propiedades magnéticas topológicas deseadas.
- La Inteligencia Artificial puede ser una herramienta poderosa para abordar este desafío, gracias a su capacidad para analizar grandes cantidades de datos y extraer patrones complejos.
- Mi enfoque se centra en aplicar algoritmos de aprendizaje automático avanzados, como Vision Transformers, para la clasificación automática de fases magnéticas topológicas y la predicción de propiedades magnéticas.
- La realización de esta tesis tiene como objetivo fusionar mis habilidades en ciencia de datos con la física de materiales, a fin de contribuir a la comprensión fundamental de las texturas magnéticas topológicas y optimizar la identificación de nuevos compuestos para aplicaciones espintrónicas.



# Marco Conceptual I: Interacciones Magnéticas

- **DFT (Teoría del Funcional de la Densidad):** Permite derivar  $J$ ,  $\vec{D}$ ,  $K$  sin parámetros empíricos. Usa el formalismo de Liechtenstein.
- **Intercambio de Heisenberg ( $J$ ):** Determina el tipo de orden magnético.

$$H_J = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

Si  $J_{ij} > 0 \rightarrow$  ferromagnetismo,  $J_{ij} < 0 \rightarrow$  antiferromagnetismo.

- **Interacción Dzyaloshinskii–Moriya (D):** Favorece espines chirales.

$$H_D = - \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j)$$

Surge por acoplamiento espín–órbita y ruptura de simetría de inversión.



## Marco Conceptual II: Anisotropía y Hamiltoniano Total

- **Anisotropía Magnetocrystalina ( $K$ ):** Estabiliza orientaciones preferidas del espín.

$$H_K = -K \sum_i (\vec{S}_i \cdot \hat{n})^2$$

Si  $K > 0$ : preferencia fuera del plano;  $K < 0$ : en el plano.

- **Hamiltoniano completo:** Incluye todas las contribuciones magnéticas.

$$H = H_J + H_D + H_K - \mu \sum_i \vec{B} \cdot \vec{S}_i$$

En esta expresión, el último término representa la energía de Zeeman



- **Simulaciones de Monte Carlo:** Exploran fases magnéticas en el espacio ( $B$ ,  $T$ ). Permiten observar skyrmiones, merones, bimerones, etc.
- **Vision Transformers (ViT):** Clasifican fases magnéticas topológicas a partir de mapas de espín como imágenes.

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

Capturan patrones espaciales complejos y no locales.



### 3. Justificación: Relevancia Científica y Metodológica

- **Científica:**

- Los skyrmiones son clave para memorias espintrónicas de alta densidad y bajo consumo.
- Se requiere descubrir materiales 2D que los estabilicen, como los tri-haluros  $MCl_3$ , donde ( $M=V,Cr$ ).
- El dopaje permite modular helicidad, tamaño y estabilidad topológica.

- **Metodológica:**

- Integra DFT, simulaciones de Monte Carlo y Vision Transformers.
- El uso de IA automatiza la clasificación de fases magnéticas complejas.



### 3. Justificación: Impacto Institucional y Nacional

- **UNMSM:**

- Fortalece al GMCAN y al LMSC en física computacional e IA aplicada.
- Justifica inversión en infraestructura HPC(High Performance Computing).

- **Perú:**

- Forma talento en áreas estratégicas: IA, magnetismo, simulación.
- Aporta al desarrollo tecnológico nacional y reduce dependencia externa.



## 4. Objetivos de la Investigación

### Objetivo General:

- Desarrollar una metodología computacional avanzada que integre DFT, simulaciones de Monte Carlo y redes Vision Transformer (ViT) para identificar y clasificar fases magnéticas topológicas (como skyrmiones) en materiales 2D  $MCl_3$ , puros y dopados.

### Objetivos Específicos:

- Generar un conjunto de datos representativo de configuraciones de espín(B-T) a partir de simulaciones de Monte Carlo, utilizando parámetros magnéticos ( $J$ ,  $D$ ,  $K$ ) derivados de DFT.
- Diseñar y entrenar un modelo ViT para clasificar automáticamente fases magnéticas.
- Correlacionar las fases predichas con propiedades físicas (helicidad, número topológico) y efectos del dopaje.



## 5. Hipótesis de la Investigación

### Hipótesis Principal

La integración de simulaciones de Monte Carlo, con parámetros magnéticos ( $J$ ,  $D$ ,  $K$ ) obtenidos de cálculos DFT, junto con redes neuronales Vision Transformer (ViT) para la clasificación automática de fases magnéticas, permitirá acelerar significativamente el descubrimiento y caracterización de skyrmiones, bimerones y merones en materiales 2D tipo  $MCl_3$ , tanto puros como dopados.



## 6. Metodología (I): Enfoque General

- **Tipo de investigación:** Básica-aplicada, con desarrollo experimental computacional(simulaciones).
- **Enfoque multiescala:** Integra física del estado sólido, simulaciones y aprendizaje automático.
- **Técnicas principales:**
  - Cálculos de primeros principios (DFT/DFT+U).
  - Simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis.
  - Clasificación automática con Vision Transformers (ViT).



## 6. Metodología (II): Etapas Principales

- ① **Derivación de parámetros magnéticos** ( $J$ ,  $D$ ,  $K$ ) desde DFT mediante el formalismo de Liechtenstein.
- ② **Construcción del Hamiltoniano clásico** con esos parámetros.
- ③ **Simulaciones de Monte Carlo** para generar configuraciones de espín y diagramas de fase ( $B-T$ ).
- ④ **Generación de datos sintéticos** (mapas de espín) para entrenamiento de IA.



## 6. Metodología (III): Clasificación y Validación

- **Modelo Vision Transformer (ViT):**

- Entrenado con configuraciones de espín simuladas.
- Clasifica fases magnéticas: skyrmiones, merones, espirales, etc.

- **Evaluación del modelo:**

- Precisión, F1-score, matriz de confusión.
- Capacidad de generalización en materiales dopados.

- **Correlación final:**

- Propiedades físicas vs. predicciones IA.
- Impacto del dopaje sobre helicidad, estabilidad y número topológico.



# Instrumentos y Herramientas

- **DFT:** Quantum ESPRESSO, VASP.
- **Modelos de espín:** Spirit, VAMPIRE.
- **Redes neuronales:** PyTorch, TensorFlow.
- **Visualización y análisis:** VESTA, Matplotlib.

