

CVAS DE LOS IPS Y SU CAPACIDAD FORMATIVA

PI: JESÚS CARRETE

Mi carrera científica se ha desarrollado en los ámbitos de la física de la materia condensada y la ciencia de materiales, enfocados desde los puntos de vista teórico y computacional. Durante mi tesis doctoral (2007-2012) me dediqué al estudio de los fenómenos de transporte térmico y eléctrico en nanoestructuras semiconductoras y líquidos iónicos. Para ello, diseñé, implementé y utilicé diferentes métodos de simulación, tanto ab initio como basados en potenciales semiclásicos. Asimismo, realicé contribuciones puramente teóricas a la mecánica estadística de fuera del equilibrio.

Mi estancia postdoctoral de dos años en el CEA-Grenoble me permitió llevar mi trabajo como científico computacional a una escala mayor mediante la implementación de aproximaciones de alta cadencia para el estudio de materiales termoeléctricos. Este tipo de enfoques metodológicos permiten el descubrimiento de materiales revolucionarios mediante el filtrado de grandes bibliotecas de candidatos, y requieren una planificación y una ejecución mucho más elaboradas que las aproximaciones convencionales. En este campo se dan cita la física de materiales, las bases de datos, los más recientes métodos estadísticos y de inteligencia artificial y la automatización. Gracias a estos trabajos, obtuve a continuación un contrato permanente como ingeniero de investigación en la misma institución. De esa segunda etapa en el CEA-Grenoble cabe destacar el inicio del ambicioso proyecto ALMA para el estudio del transporte térmico en materiales nanoestructurados a partir de primeros principios. Sus resultados han demostrado poder predictivo en numerosos sistemas con defectos reales antes considerados intratables.

En diciembre de 2016 me trasladé a Viena para tomar posesión de un puesto permanente como "Senior scientist" en la TU Wien. Allí posición compaginé la docencia con el trabajo puntero de investigación en transporte térmico y eléctrico y en el uso de métodos de aprendizaje automático para extender la precisión de los métodos de primeros principios a escalas donde su coste computacional impide su uso directo. En 2022 obtuve mi actual plaza como Investigador Científico del CSIC en oposición turno libre, y en octubre de 2023 me incorporé al Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón, donde continúo mi investigación.

Mis intereses prácticos se centran en la exploración de nuevos materiales para aplicaciones de especial importancia tecnológica relacionadas con la energía: líquidos iónicos, semiconductores para termoelectricidad, óxidos complejos con superficies de interés para catálisis, nanoestructuras 1D y 2D, etc. Mantengo colaboraciones

estrechas con grupos de investigación de Europa, América y Asia, en instituciones como las Universidades de GuangXi y ShenZhen (China) o Duke (EE.UU.).

He generado más de 140 artículos publicados en revistas internacionales, que han sido citados más de 8000 veces según SCOPUS, con un índice h de 44. Soy, asimismo, co-desarrollador y responsable del mantenimiento de tres paquetes de código abierto para el cálculo de propiedades de transporte en sólidos cristalinos: ShengBTE, almaBTE y BoltzTraP2. En conjunto suman miles de usuarios. El desarrollo de la teoría y los métodos subyacentes a esos paquetes ha sido reconocido con el "Young Scientist Prize in Computational Physics", que me fue otorgado por la IUPAP en 2019. Más recientemente he publicado un paquete abierto para la construcción de campos de fuerza mediante redes neuronales, NeurallL, y una biblioteca de optimización evolutiva, Clinamen2.

Cuento también con varias decenas de presentaciones en congresos y escuelas nacionales e internacionales, en su mayoría como orador invitado. Soy coautor de un libro de texto en castellano, un cuaderno didáctico y tres capítulos en libros especializados de editoriales internacionales. Soy investigador principal de un proyecto nacional austriaco y lo he sido de una iniciativa bilateral entre Austria y la India. Fui también "key person" a cargo del desarrollo de software en el proyecto europeo H2020 ALMA y co-IP en el subproyecto 9 de la "Spezialforschungsbereich" TACO, uno de los mayores proyectos financiados por la agencia nacional austriaca. He participado como investigador en numerosos proyectos financiados por organizaciones españolas, francesas y austriacas. He colaborado en la formación de jóvenes investigadores participando en la supervisión de trabajos fin de grado, trabajos fin de máster y tesis doctorales en Grenoble y Viena. También he actuado como supervisor de estancias en el extranjero para tres becarios FPU enviados desde España.

ÚLTIMAS PUBLICACIONES:

- 1) **Neural-network-enabled molecular dynamics study of HfO₂ phase transitions.** Sebastian Bichelmaier, Jesús Carrete, Georg K. H. Madsen. arXiv:2408.02429, 2024.
- 2) **Transformer wave function for quantum long-range models.** Sebastián Roca-Jerat, Manuel Gallego, Fernando Luis, Jesús Carrete, David Zueco. arXiv:2407.04773, 2024.
- 3) **Machine-learning-backed evolutionary exploration of Ti-rich SrTiO₃ (110) surface reconstructions.** Ralf Wanzenböck, Esther Heid, Michele Riva, Giada Franceschi, Alexander M. Imre, Jesús Carrete, Ulrike Diebold, Georg K. H. Madsen. ChemRxiv, doi:10.26434/chemrxiv-2024-9l6jc, 2024.
- 4) **Phonon transport in defect-laden bilayer Janus PtSTe studied using neural-network force fields.** Lijun Pan, Jesús Carrete, Zhao Wang, Georg KH Madsen. J. Phys. Chem. C 128, 11024-11032, 2024.

- 5) ***Clinamen2: Functional-style evolutionary optimization in Python for atomistic structure searches***. Ralf Wanzenböck, Florian Buchner, Péter Kovács, Georg KH Madsen, Jesús Carrete. *Comput. Phys. Commun.* 297, 109065, 2024.

CO-PI: DAVID ZUECO

Mi carrera académica comenzó con la obtención de la licenciatura en julio de 2002 en la Universidad de Zaragoza. En enero de 2007 completé mi doctorado en la misma universidad. Posteriormente, en mayo de 2007, me trasladé a Augsburgo (Alemania) con un contrato postdoctoral en el grupo de Peter Hänggi. Desde abril de 2011 hasta julio de 2020, fui investigador de ARAID (Aragón Investigación y Desarrollo) en el ICMA. Además, entre 2014 y 2020, ocupé el cargo de profesor asociado en la Universidad de Zaragoza. En julio de 2020 obtuve una plaza como científico titular en el CSIC, trabajando en el INMA.

En 2018, recibí la Beca Leonardo de la Fundación BBVA, y en 2019 fui galardonado con el Premio de Investigación de la Real Academia de Ciencias de Zaragoza. Desde 2021, coordino el Máster en Tecnologías Cuánticas, coordinado por la Universidad Internacional Menéndez Pelayo.

Mis investigaciones se centran en la dinámica cuántica fuera del equilibrio, la óptica cuántica y el magnetismo cuántico. Hace ya un tiempo demostramos un resultado sobre la exactitud de las ecuaciones maestras y, también, desarrollamos un método para preservar el entrelazamiento a altas temperaturas. En óptica cuántica he trabajado en métodos analíticos y numéricos en óptica cuántica en el régimen ultrafuerte del acoplo luz-materia. Más recientemente hemos desarrollado una teoría exacta de cavity QED materials y su relación con sistemas de largo alcance. En magnetismo cuántico, he investigado el uso de imanes moleculares para la computación cuántica. Finalmente estoy trabajando en la aplicación de IA para simular materiales cuánticos de baja dimensionalidad.

Hasta la fecha, he acumulado más de 5800 citas y tengo un índice h de 37 (en Scholar) o más de 4100 citas (índice h=32) (en Scopus). Se puede encontrar información actualizada sobre mis publicaciones en mis perfiles de Scholar y Scopus.

He supervisado las tesis doctorales de Fernando Quijandría (octubre de 2015), Eduardo Sánchez-Burillo (noviembre de 2017, Premio a la Mejor Tesis de la RSEF) Jorge Calvo (marzo de 2021) y Marcos Rubín (mayo de 2024). Fernando actualmente es científico en el Instituto de Ciencia y Tecnología de Okinawa en Japón, Eduardo es científico de datos en una empresa de IA, Jorge es profesor de secundaria y Marcos es postdoctorando en

el INMA. Actualmente, superviso las tesis doctorales de Sebastián Roca-Jerat (desde 2021), Juan Román-Roche (desde 2020), Sergi Terradas (desde 2019), David González (desde 2022) y Xavi del Arco (desde 2023). Además, he dirigido 21 proyectos de fin de grado (TFGs), 17 de ellos en los últimos 10 años, y 9 proyectos de fin de máster (TFMs), 7 de ellos en los últimos 10 años.

Finalizo con mis actividades de divulgación y liderazgo. Desde 2019, fui editor de la revista Entropy (cargo que decliné el año pasado por preocupaciones sobre las prácticas de MDPI). Fui jefe de mi departamento en el ICMA durante cuatro años (2016-2020). He organizado dos conferencias internacionales y he coordinado una serie de seminarios llamados “Quantum Tuesdays” desde 2013, disponibles en <https://www.qmad.es/quantum-tuesdays>. Además, actúo como evaluador para diversas agencias de investigación, tanto españolas como internacionales.

ÚLTIMAS PUBLICACIONES:

- 1) ***Transformer wave function for quantum long-range models***. Sebastián Roca-Jerat, Manuel Gallego, Fernando Luis, Jesús Carrete, David Zueco. arXiv:2407.04773, 2024.
- 2) ***Cavity QED materials: Comparison and validation of two linear response theories at arbitrary light-matter coupling strengths***. Juan Román-Roche, Álvaro Gómez-León, Fernando Luis, David Zueco. arXiv:2406.11971, 2024.
- 3) ***Linear response theory for cavity QED materials***. Juan Román-Roche, Álvaro Gómez-León, Fernando Luis, David Zueco. arXiv:2406.11957, 2024.
- 4) ***Waveguide QED at the onset of spin-spin correlations***. Sebastián Roca-Jerat, Marcos Rubín-Osanz, Mark D. Jenkins, Agustín Camón, Pablo J. Alonso, David Zueco, Fernando Luis. arXiv:2404.03727, 2024.
- 5) ***Scanning spin probe based on magnonic vortex quantum cavities***. Carlos A. González-Gutiérrez, David García-Pons, David Zueco, María José Martínez-Pérez. arXiv:2401.06549, 2024.

PLAN DE FORMACIÓN

El candidato seleccionado para el doctorado se integrará en el "Programa de Doctorado en Física" de la Universidad de Zaragoza (UNIZAR). Este programa doctoral se distingue por su enfoque multidisciplinario, abarcando temas en tres ciencias naturales: Física, Química y Biología. Esta multidisciplinariedad es altamente sinérgica con la formación integral del candidato en el tema de esta propuesta: la aplicación del aprendizaje automático a la Ciencia de Materiales.

Más concretamente, el investigador predoctoral se formará a través de:

a) Reuniones y discusiones:

El trabajo de investigación estará articulado mediante discusiones regulares con los tutores.

b) Integración en el grupo de investigación:

El estudiante se incorporará a un grupo de investigación con miembros senior expertos en física computacional e inteligencia artificial. Durante los dos próximos años coincidirá, además, con dos estudiantes de doctorado que trabajan en cálculos cuánticos de muchos cuerpos. En el grupo se fomentan las sinergias entre los estudiantes de doctorado, con proyectos liderados por ellos mismos.

c) Reuniones y actividades complementarias:

El grupo organiza reuniones periódicas y un "journal club". Además, el investigador se incorporará a la red PYSQT, que agrupa a doctorandos en el campo de las tecnologías cuánticas en España. Esta red ofrece la oportunidad de asistir a seminarios periódicos y presentar su trabajo.

Se contempla al menos una estancia, que permitirá al doctorando ampliar su bagaje metodológico en el contexto de un grupo de investigación puntero y acelerará decisivamente el desarrollo de una de las áreas de aplicación previstas en el programa de trabajo.

Ya que los objetivos del proyecto se apoyan en los métodos de aprendizaje automático e inteligencia artificial, el doctorando pretende una sólida formación tanto en los aspectos fundamentales de esas disciplinas como en los detalles de su implementación y cómo se despliegan en la práctica en entornos modernos. Para ello se plantean cursos avanzados en línea impartidos ofertados en la plataforma Coursera:

- "Introduction to Git and GitHub" y "Troubleshooting and Debugging Techniques" (50 horas): parte del certificado profesional "Google IT Automation with Python", impartido por Google. Estos dos cursos dotarán al investigador de nociones teóricas y métodos

prácticos para el uso del control de versiones, pieza esencial del desarrollo de software moderno.

- "Deep Neural Networks with PyTorch" (30 horas): curso impartido por IBM que ofrece una extensa cobertura de una del principal conjunto de bibliotecas del ecosistema para el aprendizaje automático en Python.

- "Foundations of Data Structures and Algorithms Specialization": ciclo impartido por la Universidad de Colorado en Boulder (240 horas), con un excelente tratamiento fundamental y aplicado de los algoritmos básicos para tratar con estructuras como grafos y cadenas, herramienta esencial para el desarrollador moderno preocupado por la eficiencia de su código.

Adicionalmente, se planea la participación en dos cursos de verano. La selección de cursos será guiada por la temática y el estado de desarrollo del proyecto. Se prevé la asistencia a una reunión científica especializada en cada uno de los cuatro años de duración del proyecto.

Gracias al carácter de instituto mixto del INMA, y la consecuente sinergia con Unizar, el PI y el co-PI participan en la supervisión de trabajos académicos dirigidos. En los últimos años el co-IP ha co-dirigido aproximadamente tres trabajos de fin de grado y un trabajo de fin de máster por año. Además, en el grupo se fomenta que esos trabajos de fin de grado sean tutorizados por estudiantes de doctorado, como parte de su formación. Para esta convocatoria se pondrá un énfasis específico en facilitar al investigador el acceso a esa tutoría alrededor de los temas de investigación del proyecto, que la experiencia indica resultan además muy atractivos para los estudiantes de grado en Unizar.

LÍNEA DE INVESTIGACIÓN A LA QUE SE INCORPORA

El objetivo de este proyecto es aplicar *ansätze* y solucionadores avanzados de inteligencia artificial para abordar problemas no resueltos fundamentales en la ciencia de materiales. Las tareas específicas se encuadran dentro del objetivo 2 del proyecto AINMA. En particular se organiza en torno a los siguientes objetivos específicos:

O1. Simular propiedades de equilibrio y fuera de equilibrio de modelos cuánticos de espines y fermiones utilizando arquitecturas avanzadas de inteligencia artificial. Se llevará a cabo la optimización variacional de *ansätze* basados en NNs para determinar el estado fundamental. Este enfoque busca superar las restricciones de los métodos numéricos convencionales en sistemas fuertemente correlacionados. Se examinarán modelos de baja dimensionalidad en magnetismo cuántico, especialmente el modelo de Heisenberg con anisotropía en 2D, modelos frustados así como modelos de fermiones como el de Fermi-Hubbard. También se estudiará la dinámica a través del principio variacional dependiente del tiempo, y se comprobarán las limitaciones de estas técnicas en comparando con plataformas de simuladores cuánticos.

O2. Predecir las energías libres de sólidos cristalinos con alta anarmonicidad mediante modelos generativos basados en flujos de normalización: Se implementará una técnica para replicar la función de densidad de probabilidad en el espacio real de los átomos en un sólido cristalino usando composiciones de funciones biyectivas parametrizadas como NNs. El objetivo es proporcionar un método más rápido y preciso en comparación con los cálculos actuales basados en *ansätze* armónicos efectivos. A partir de esta distribución se extraerán espectros vibracionales dependientes de la temperatura y energías libres. El primer caso de estudio serán cristales de la familia de las perovskitas que muestran transiciones a una fase cúbica en función de la temperatura.