

**Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey**



**Maestría en Inteligencia Artificial Aplicada**

**Proyecto Integrador**

**Avance 2 – Ejecución de Mattergen y generación de  
materiales dobles (grafeno + oro)**

**Equipo 17**

**Carlos Giovanni Encinia González  
A01795601**

**Ignacio Antonio Quintero Chávez  
A01794419**

**Gustavo Pérez Juárez  
A01795310**

**5 de octubre de 2025**

# Mattergen

MatterGen es un modelo de inteligencia artificial creado por Microsoft y el laboratorio de materiales de la Universidad de Stanford. Su función principal es generar estructuras cristalinas nuevas (átomos y posiciones tridimensionales) que podrían corresponder a materiales reales o aún no sintetizados. MatterGen no 'dibuja' moléculas, sino que predice la red cristalina; es decir, cómo los átomos se organizan en una estructura sólida estable.

## Problemática a resolver con materiales dobles(Objetivo de uso de mattergen)

El modelo MatterGen está entrenado principalmente con materiales individuales del Materials Project Database (óxidos, sulfuros, semiconductores, etc.). No fue entrenado para generar combinaciones arbitrarias de elementos; como oro + carbono, o grafeno sobre sustratos metálicos. Cuando intentamos directamente pedir combinaciones como 'chemical\_system: [Au, C]', el modelo falló con un error de condición no entrenada (AssertionError), porque 'chemical\_system' no está incluido en los campos condicionales usados durante el entrenamiento del modelo dft\_band\_gap.

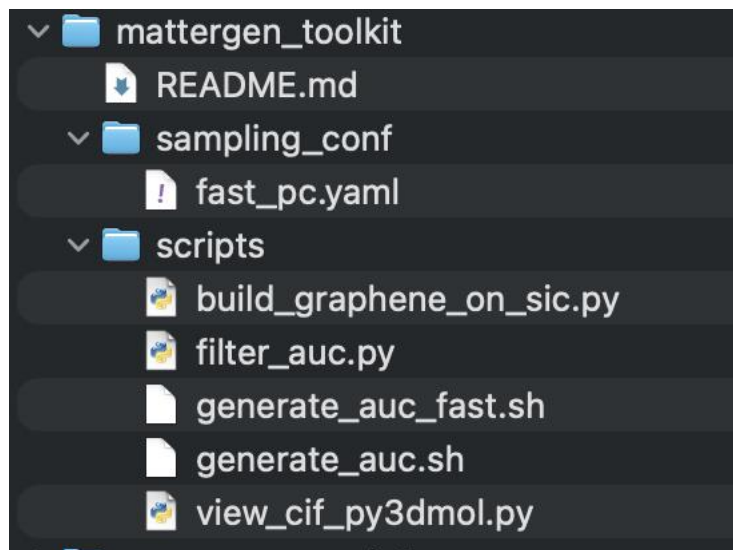
## Solución adoptada

Se usaron propiedades físicas indirectas que reflejan el tipo de material que se busca. Por ejemplo, para grafeno o materiales conductores, el band gap (dft\_band\_gap) debe ser cercano a 0.0 eV. Así que generamos materiales condicionando únicamente a esa propiedad:

```
--properties_to_condition_on={'dft_band_gap':{'target':0.0,'tolerance':0.1}}
```

Esto hace que el modelo genere materiales metálicos o semimetálicos, algunos de los cuales contienen carbono (C), oro (Au) u otros metales. Luego se filtran los resultados con un script (filter\_auc.py) para quedarse solo con estructuras que contengan ambos elementos (Au y C).

Dentro de la carpeta mattergen-toolkit se encuentran los scripts que nos permiten separar moléculas de Oro y grafito. Estos scripts tendrán que ser adaptados una vez se comiencen a generar materiales con otro tipo de conducción.



## Bibliografía

Microsoft Research. (2025). MatterGen: A new paradigm of materials design with generative AI. Recuperado de: <https://www.microsoft.com/enus/research/blog/mattergen-a-new-paradigm-of-materials-design-with-generative-ai/>.

ScienceDirect. (2024). A guide to discovering next-generation semiconductor materials using atomistic simulations and machine learning. Current Opinion in Solid State and Materials Science, 28(3), 101148. Recuperado de: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S092702562400329X>

Gogina, A. A., et al. (2024). Gold intercalation of different 6H-SiC(0001) surface. *Surface Science*, S0254058424007375. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0254058424007375?via%3Dihub>