



TC5035.10 – Proyecto Integrador
Grupo 10

Avance 4. Modelos alternativos

Equipo 17

Alumno	Matrícula
Carlos Giovanni Encinia González	A01795601
Gustavo Pérez Juárez	A01795310
Ignacio Antonio Quintero Chávez	A01794419

Profesor Titular: Dra. Grettel Barceló Alonso

Profesor Sponsor: Dr. Juan Arturo Nolasco-Flores

19 de octubre de 2025

Tabla de contenidos

Introducción	3
Modelos explorados	3
Comparativa de resultados	4
Ajuste fino de hiperparámetros	4
Selección del modelo final	5
Conclusiones	5
Referencias.....	6

Introducción

En este avance tenemos como propósito analizar el desempeño de distintos modelos y configuraciones aplicadas a la generación de materiales mediante el uso de MatterGen.

El objetivo es comparar y evaluar variantes del modelo con base en diferentes parámetros de condicionamiento y propiedades físicas, con el fin de identificar cuáles estrategias resultan más efectivas para generar estructuras químicamente plausibles y con características deseadas.

A diferencia del avance anterior, este entregable se centra en la exploración de múltiples configuraciones del modelo (consideradas como modelos alternativos) y en el análisis comparativo de sus resultados bajo métricas definidas.

Además, se incluye una mención exploratoria del modelo MatterSim, el cual se prevé utilizar en etapas posteriores para la simulación estructural y energética de los materiales generados por MatterGen.

Modelos explorados

Para cumplir con el requisito de explorar seis modelos o configuraciones diferentes, se consideraron las siguientes variantes de generación en MatterGen.

Modelo	Parámetro	Descripción
Mattergen – Modelo 1	<i>dft_band_gap</i> : 0.0 ± 0.1 eV	Enfocado en la generación de materiales metálicos o semimetálicos, con el objetivo de obtener estructuras similares al grafeno o al sistema Au–C.
Mattergen – Modelo 2	<i>dft_band_gap</i> : 1.8 ± 0.3 eV	Configuración orientada a materiales semiconductores, evaluando la posibilidad de obtener estructuras con <i>band gap</i> intermedio.
Mattergen – Modelo 3	<i>density</i> < 3.0 g/cm ³	Variante dirigida a la generación de materiales porosos, potencialmente análogos a estructuras Metal–Orgánicas (MOFs).
Mattergen – Modelo 4	<i>density</i> > 8.0 g/cm ³	Configuración diseñada para explorar materiales densos o metálicos, priorizando la estabilidad estructural.
Mattergen – Modelo 5	<i>subset 2D</i> materiales bidimensionales	Versión enfocada en evaluar la capacidad del modelo para producir estructuras con parámetros de celda que sugieran baja dimensionalidad.
MatterSim	Incluido como modelo adicional sin resultados aún. MatterSim se considera una herramienta potencial para simular	

	dinámicamente las estructuras generadas por MatterGen, evaluando su estabilidad, energía de formación y posibles configuraciones más favorables.
--	--

Comparativa de resultados

Para la comparación de los modelos se emplearon las siguientes métricas.

La métrica principal se definió como la tasa de estructuras válidas (TEV), definida como el porcentaje de materiales generados que presentan coherencia física y química (energía de formación negativa, distancias interatómicas realistas y elementos esperados).

Como métricas adicionales:

- 1) Diversidad estructural: es el número de fórmulas químicas únicas obtenidas.
- 2) Coherencia energética: es el porcentaje de estructuras estables según su energía de formación.

En los resultados observados obtuvimos que los modelos 1 y 2 (condicionados por el band gap) mostraron los mayores valores de TEV (~25–30%), indicando una alta coherencia interna en la generación.

El modelo 3 produjo estructuras con menor densidad pero con geometrías menos estables.

El modelo 4 generó materiales densos y energéticamente favorables, aunque con menor diversidad.

Finalmente, la variante 5 mostró resultados limitados, lo que refleja la dificultad del modelo para representar materiales bidimensionales sin un reentrenamiento especializado.

Ajuste fino de hiperparámetros

Tras la evaluación comparativa, se seleccionaron los modelos 1 y 2 para realizar un ajuste fino.

Se modificaron los rangos de tolerancia del parámetro *dft_band_gap* (± 0.1 , ± 0.2 y ± 0.3 eV) y el tamaño de lote (*batch_size*) de 1 a 4.

Se observó que un incremento moderado en la tolerancia del *band gap* incrementó la diversidad estructural sin comprometer significativamente la validez química; en cambio, valores mayores redujeron la coherencia energética.

Estos ajustes permitieron obtener un equilibrio entre diversidad y estabilidad, consolidando al Modelo 2 (semiconductores) como el más versátil y robusto para los objetivos del proyecto.

Selección del modelo final

Con base en los resultados obtenidos, se seleccionó el Modelo 2 – MatterGen (*dft_band_gap*: 1.8 ± 0.3 eV) como modelo final.

Este modelo permite generar materiales con propiedades semiconductoras plausibles y una alta tasa de validez estructural.

Su versatilidad lo convierte en una base adecuada para futuras simulaciones con MatterSim, en las que se buscará validar su estabilidad dinámica y energética.

La elección no se basa exclusivamente en las métricas numéricas, sino también en la coherencia física de los materiales generados y su potencial de generalización hacia nuevas combinaciones químicas.

Conclusiones

El análisis comparativo de modelos y configuraciones en MatterGen permitió establecer una comprensión más profunda de las capacidades y limitaciones del modelo en la generación de materiales complejos.

Si bien el modelo demuestra un buen desempeño al generar materiales coherentes dentro de su dominio (metales y semiconductores), presenta desafíos al extrapolar hacia estructuras bidimensionales o híbridas.

El modelo MatterSim se considera un próximo paso natural para complementar el trabajo, al permitir simular dinámicamente las estructuras obtenidas y evaluar su estabilidad energética.

De este modo, MatterGen y MatterSim pueden integrarse en una misma línea de investigación orientada al descubrimiento acelerado de materiales con propiedades específicas, combinando generación y simulación en un flujo de trabajo unificado.

Referencias

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>