

Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey



Maestría en Inteligencia Artificial Aplicada

Proyecto Integrador

**Avance 1 – Ejecución de Mattergen y objetivos de uso
de Mattergen**

Equipo 17

**Carlos Giovanni Encinia González
A01795601**

**Miguel Ignacio Antonio Quintero Chávez
A01794419**

**Gustavo Pérez Juárez
A01795310**

28 de septiembre de 2025

Mattergen

MatterGen es una herramienta de Inteligencia Artificial creada por Microsoft.

Está entrenada para imaginar y generar estructuras de materiales (como cristales o compuestos químicos) que no existen todavía en la naturaleza o en laboratorios.

Funciona como un “generador de materiales”: a partir de ciertos parámetros (ejemplo: band gap, dureza, grupo espacial), propone cómo se vería un cristal con esas propiedades.

Algunos ejemplos de ejecución usando JSON se describen en la siguiente imagen

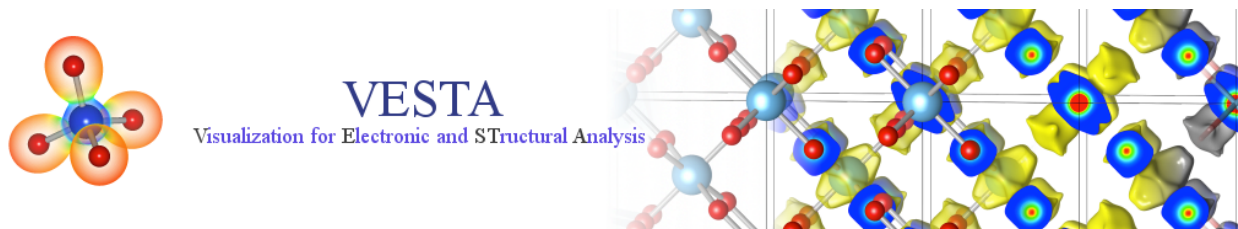
Material	Uso típico	Band Gap objetivo (eV)	Grupo espacial	Ejemplo JSON
Hierro (Fe)	Metal conductor	≈ 0	Im-3m / Fm-3m	<code>{"dft_band_gap":{"target":0.0,"tolerance":0.05}}</code>
Cobre (Cu), Al (Al)	Conductores	≈ 0	-	<code>{"dft_band_gap":{"target":0.0,"tolerance":0.05}}</code>
Silicio (Si)	Semiconductores, chips	1.1 ± 0.2	Fd-3m	<code>{"dft_band_gap":{"target":1.1,"tolerance":0.2}}</code>
GaAs	Optoelectrónica, LEDs	1.4 ± 0.2	-	<code>{"dft_band_gap":{"target":1.4,"tolerance":0.2}}</code>
NaCl	Aislante	6 ± 0.5	Fm-3m	<code>{"dft_band_gap":{"target":6.0,"tolerance":0.5}}</code>
MgO	Refractario, aislante	7.8 ± 0.5	Fm-3m	<code>{"dft_band_gap":{"target":7.8,"tolerance":0.5}}</code>
Diamante (C)	Muy duro	5.5	Fd-3m	<code>{"ml_bulk_modulus":{"min":400}}</code>
Carburos (WC, TiC, Fe ₃ C)	Alta dureza	≈ 0	Pnma / varios	<code>{"dft_band_gap":{"target":0.0,"tolerance":0.05}}</code>
NiO	Magnético	≈ 4	-	<code>{"dft_band_gap":{"target":4.0,"tolerance":0.3}}</code>
Perovskitas (SrTiO ₃)	Celdas solares, baterías	≈ 3.2	Pm-3m	<code>{"dft_band_gap":{"target":3.2,"tolerance":0.3},"space_group":"Pm-3m"}</code>

Durante esta semana nos enfocamos a utilizar el modelo para generar algunos materiales cristalizados como pruebas de concepto, para presentar con al encargado del proyecto en Chalmers.

Los resultados los podemos ver en las carpetas results y results_cond

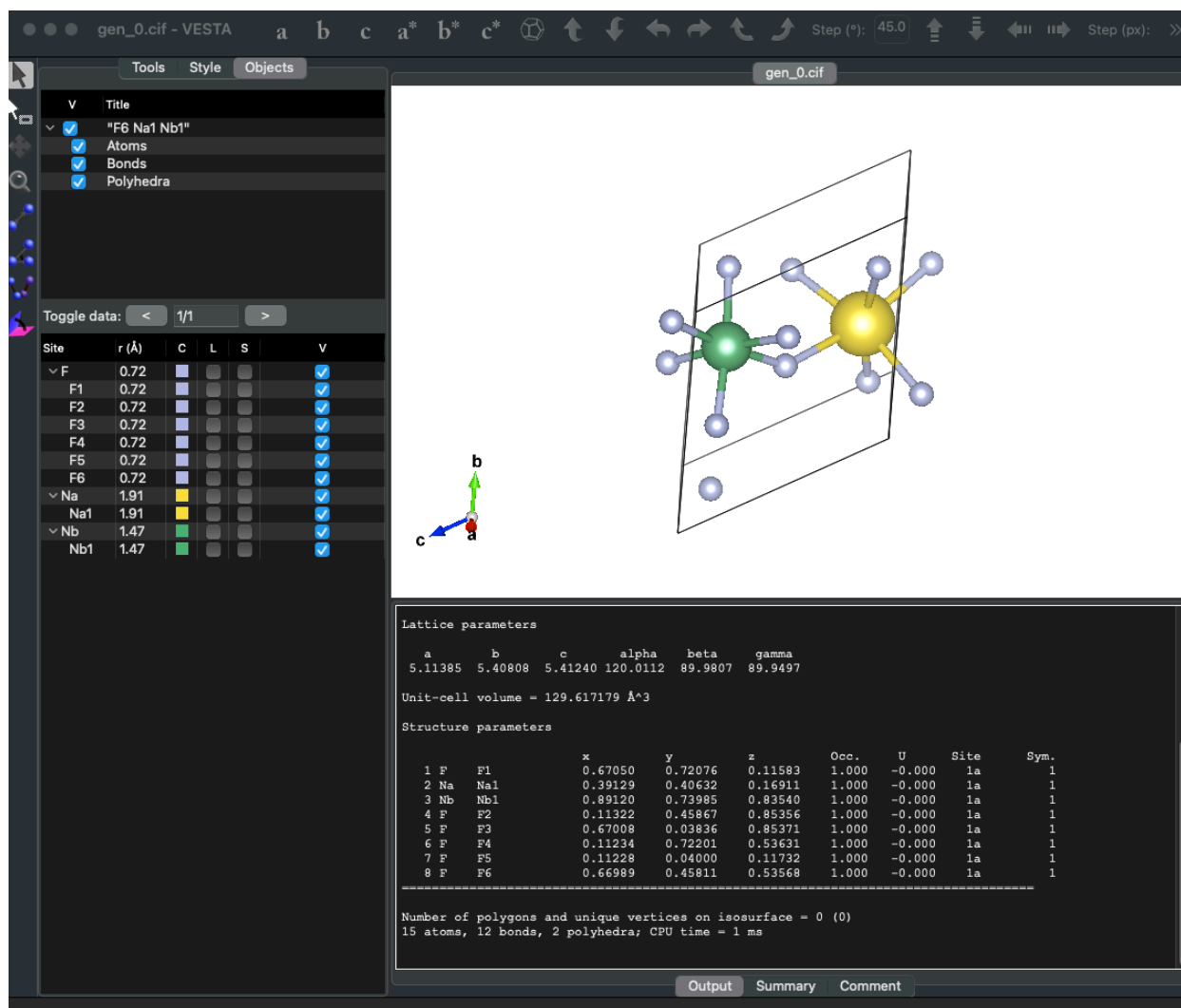
```
assets
benchmark
checkpoints
CODE_OF_CONDUCT.md
CONTRIBUTING.md
data-release
datasets
LICENSE
mattergen
mattergen.egg-info
MODEL_CARD.md
NOTICE
out_metal
pyproject.toml
README.md
results
results_cond
sampling_conf
SECURITY.md
```

Se pueden visualizar a través del uso de VESTA, que es un software de visualización.



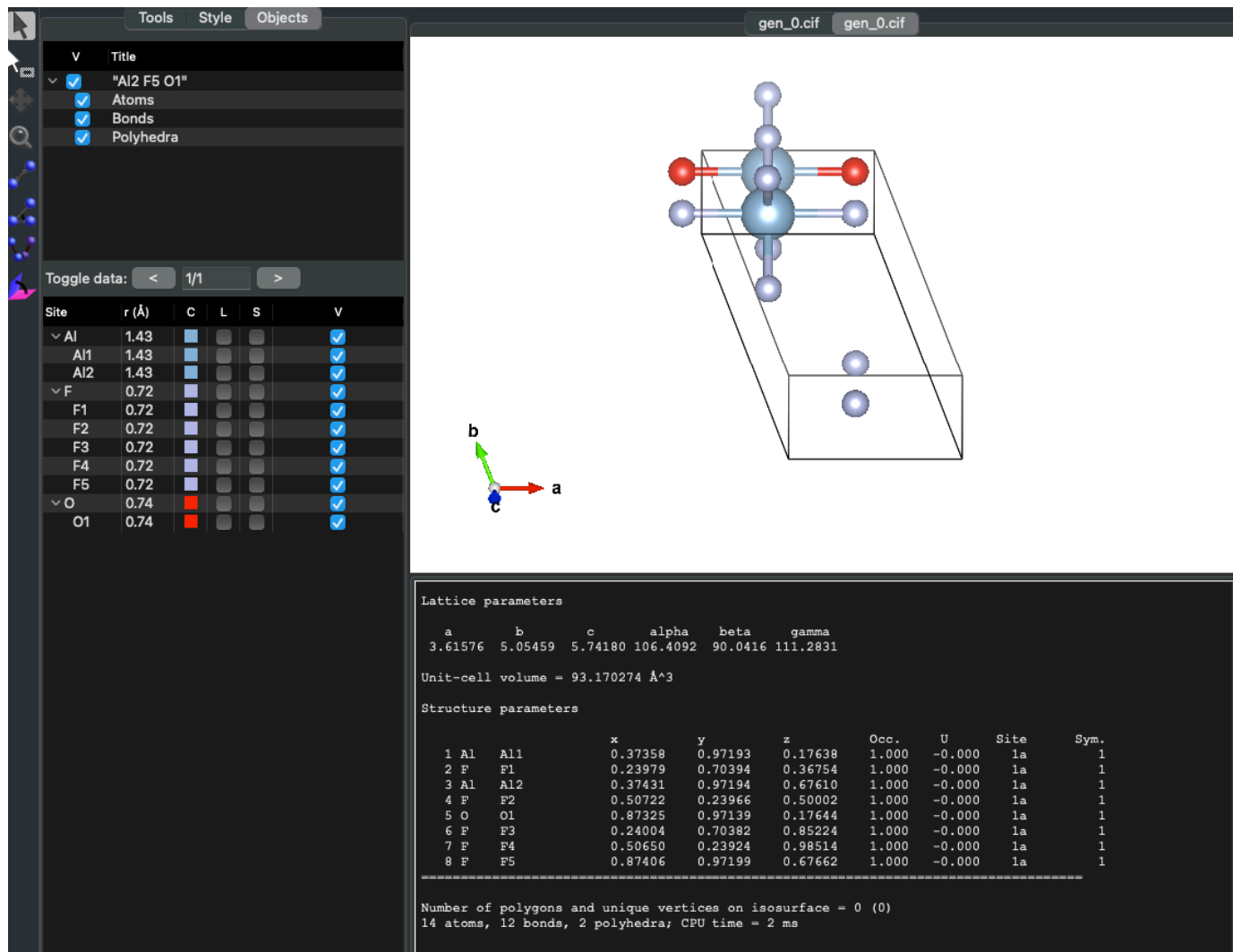
A continuación algunos ejemplos de cristales generados con Mattergen:

Ejemplo de fluoroniobato de sodio



Ejemplo de **fluoro-óxido de aluminio** (mezcla de Al con flúor y oxígeno) generada por mattergen a partir de las siguientes propiedades:

```
mattergen-generate results_cond/ \
  --pretrained-name dft_band_gap \
  --batch_size=1 \
  --num_batches=1 \
  --properties_to_condition_on="{\"dft_band_gap\":{\"target\":1.8,\"tolerance\":0.3}}
```



Objetivos de uso de Mattergen

Una vez realizada la llamada con el equipo de Chalmers se define como alcance de proyecto para la generación de partículas a través de Mattergen los siguientes:

- Generación de materiales bidimensionales
- Simulación de Grafeno epitaxial intercalado con oro
- Estructuras Metal-Orgánicas: materiales cristalinos formados por; nodos metálicos (iones o clusters de metales como Zn, Cu, Fe, etc.) ligados orgánicos (moléculas que actúan como "puentes") generando una red tridimensional muy porosa (llena de huecos).
- Generación de materiales semiconductores a partir de Grafenos