

A generative model-driven pipeline for post-hoc prioritization of candidates in nonlinear optical materials discovery

André Lopes¹, Carlos E. Santos¹, Sergio Michielon², Rosiane de Freitas¹

^[1]Instituto de Computação, Universidade Federal do Amazonas - IComp/UFAM

^[2]Departamento de Engenharia Física, Universidade Federal do Amazonas - ICE/UFAM
Manaus-AM, Brasil

{andre.teixeira, carlos.santos, rosiane}@icomp.ufam.edu.br, s.michielon@gmail.com

Abstract. Discovering nonlinear optical (NLO) materials for quantum photonic applications remains challenging because of the vastness of chemical space and the high cost of first-principles calculations. Generative machine learning models, such as the Conditional Variational Autoencoder (CVAE- χ^2), enable targeted generation of novel candidates, but their outputs do not guarantee physical feasibility. In this work, we propose a generative model-driven pipeline to post-hoc prioritize 1,000 synthetic candidates previously generated by a CVAE- χ^2 conditioned to a band gap range of 2–4 eV. The pipeline sequentially applies band gap filtering, thermodynamic stability estimation via the energy above the convex hull (ΔE_{hull}) obtained from the nearest neighbor in the Materials Project database, non-centrosymmetric symmetry selection, and a heuristic SPDC figure of merit. This multi-criteria data-mining strategy reduced the original candidate set to a single physically consistent material (Cristal_CVAE_382), which showed competitive performance compared with commercial NLO crystals such as PPLN, PPKTP, and BBO. The proposed approach provides an effective and reproducible screening strategy that bridges generative artificial intelligence and materials science, significantly narrowing the search space for subsequent DFT calculations and experimental synthesis in the pursuit of future quantum technologies.

CCS Concepts: • **Applied computing** → **Physical sciences and engineering**; • **Computing methodologies** → **Machine learning**.

Keywords: conditional variational autoencoder, generative artificial intelligence, materials discovery, nonlinear optical materials, quantum technologies, SPDC.

1. INTRODUÇÃO

O desenvolvimento de materiais ópticos não lineares (Nonlinear Optical – NLO) é fundamental para tecnologias quânticas, especialmente em computação fotônica, comunicação quântica e metrologia de alta precisão. Entre suas aplicações, destaca-se a conversão paramétrica descendente espontânea (Spontaneous Parametric Down-Conversion – SPDC), amplamente empregada na geração de pares de fótons emaranhados e que requer materiais com band gap adequado, estrutura cristalina não centrossimétrica e estabilidade termodinâmica [Boyd 2020; Kwiat et al. 1999; Xie et al. 2023].

A descoberta de materiais com essas características permanece desafiadora devido à enorme dimensão do espaço químico e ao elevado custo dos cálculos baseados em Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Nesse contexto, modelos de Inteligência Artificial generativa, como os Autoencoders Variacionais Condicionais (CVAEs), vêm sendo empregados para acelerar o *inverse design* de materiais, possibilitando a geração de candidatos direcionados a propriedades específicas [Lopes et al. 2026; Kingma and Welling 2022; Sohn et al. 2015; Matsunoshita et al. 2023].

Como primeira etapa desta linha de pesquisa, foi desenvolvido um pipeline baseado em Random Forest, matminer [Ward et al. 2018] e no modelo CVAE- χ^2 , treinado com dados do Materials Project [Horton et al. 2025] e condicionado à geração de vetores sintéticos com band gap entre 2 e 4 eV, faixa considerada adequada para aplicações em SPDC. Os resultados apresentados no WCQ 2025 mostraram que 65,1% dos vetores gerados atenderam a esse critério, evidenciando o potencial da Inteligência Artificial Generativa para a descoberta direcionada de materiais NLO [Lopes et al. 2026; Lopes et al.

2025]. Entretanto, esses vetores representam candidatos inéditos no espaço de descritores químicos e não garantem, por si só, a viabilidade física dos materiais correspondentes, tornando necessária uma etapa de triagem capaz de priorizar aqueles com maior potencial para análises posteriores.

Neste trabalho, propõe-se um pipeline de triagem multicritério para os candidatos gerados pelo CVAE- χ^2 , utilizando, como aproximação, as propriedades do material correspondente ao vizinho mais próximo no espaço de descritores do Materials Project. São aplicados sequencialmente critérios de band gap, estabilidade termodinâmica, simetria cristalográfica e a Pontuação Heurística de Priorização Orientada à SPDC ($SPDC_{est}$). Como principal contribuição, estabelece-se um pipeline reproduzível para priorizar candidatos destinados a futuras validações por DFT e síntese experimental, complementando a etapa de geração apresentada no WCQ 2025.

O restante deste artigo está organizado da seguinte forma: a Seção 2 apresenta a fundamentação teórica; a Seção 3 descreve o problema investigado e os trabalhos relacionados; a Seção 4 apresenta a metodologia proposta; a Seção 5 discute os resultados; e a Seção 6 apresenta as considerações finais.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Materiais ópticos não lineares (*Nonlinear Optical* – NLO) são fundamentais para tecnologias fotônicas e quânticas por possibilitarem processos como geração de segundo harmônico (SHG) e conversão paramétrica descendente espontânea (*Spontaneous Parametric Down-Conversion* – SPDC), amplamente utilizada na geração de pares de fótons emaranhados para computação e comunicação quânticas [Boyd 2020; Kwiat et al. 1999].

Na SPDC, as leis de conservação da energia e do momento são expressas por:

$$\omega_p = \omega_s + \omega_i \quad (1)$$

$$\mathbf{k}_p = \mathbf{k}_s + \mathbf{k}_i \quad (2)$$

A ocorrência desse processo requer suscetibilidade óptica não linear de segunda ordem (χ^2) diferente de zero, condição satisfeita apenas por cristais não centrossimétricos, tornando a não centrossimetria um requisito essencial para aplicações em óptica quântica [Boyd 2020; Xie et al. 2023].

2.1 Requisitos para Materiais NLO Aplicados à SPDC

Além da não centrossimetria, materiais destinados à SPDC devem satisfazer simultaneamente requisitos eletrônicos e termodinâmicos. Um dos principais é o band gap eletrônico, que influencia diretamente a transparência óptica e a resposta não linear do material. Compostos com band gap entre 2 e 4 eV oferecem um compromisso adequado entre baixa absorção óptica e elevada eficiência para fontes SPDC bombeadas na região do ultravioleta próximo e do visível [Xie et al. 2023].

Outro requisito essencial é a estabilidade termodinâmica, uma vez que materiais metaestáveis, embora possam apresentar propriedades eletrônicas promissoras, frequentemente são inviáveis para síntese experimental [Horton et al. 2025]. Dessa forma, estratégias modernas para descoberta de materiais NLO combinam band gap, estabilidade termodinâmica e simetria cristalográfica como critérios complementares de seleção [Boyd 2020; Xie et al. 2023].

2.2 Inteligência Artificial Generativa para Descoberta de Materiais

O desenvolvimento recente de técnicas de Inteligência Artificial vem transformando a descoberta de novos materiais. Em contraste com abordagens tradicionais baseadas exclusivamente em cálculos de

primeiros princípios ou experimentação laboratorial, modelos de aprendizado de máquina permitem explorar grandes espaços químicos de forma significativamente mais eficiente [Sanchez-Lengeling and Aspuru-Guzik 2018].

Entre essas abordagens, destaca-se o design inverso (*inverse design*), no qual o objetivo consiste em gerar novos materiais condicionados às propriedades desejadas, em vez de apenas prever propriedades de materiais já conhecidos [Sanchez-Lengeling and Aspuru-Guzik 2018]. Essa estratégia tem demonstrado elevado potencial para acelerar o desenvolvimento de semicondutores, supercondutores, materiais catalíticos e materiais ópticos não lineares.

Nesse contexto, modelos generativos tornaram-se uma das principais ferramentas da Inteligência Artificial aplicada à Ciência dos Materiais, permitindo aprender distribuições estatísticas dos dados experimentais e gerar candidatos inéditos com propriedades previamente especificadas.

2.3 Autoencoders Variacionais Condicionais

Os Autoencoders Variacionais (VAEs), propostos por Kingma e Welling [Kingma and Welling 2022], aprendem representações probabilísticas capazes de gerar novas amostras. A extensão proposta por Sohn, Lee e Yan [Sohn et al. 2015], denominada Autoencoder Variacional Condicional (CVAE), incorpora variáveis condicionais para direcionar a geração de candidatos com propriedades específicas.

Na Ciência dos Materiais, os CVAEs têm sido empregados em problemas de *inverse design* e otimização. Matsunoshita et al. [Matsunoshita et al. 2023] demonstraram seu potencial na otimização de potenciais interatômicos utilizando essa arquitetura.

Neste trabalho, utiliza-se o CVAE- χ^2 para gerar vetores sintéticos condicionados ao band gap. Como o modelo opera no espaço de descritores químicos, a validação física dos candidatos é realizada utilizando, como aproximação, as propriedades do material mais semelhante identificado no Materials Project.

2.4 Estabilidade Termodinâmica e Energia Acima do *Hull*

A estabilidade termodinâmica é um dos principais critérios para seleção de candidatos a novos materiais, pois mesmo compostos com propriedades eletrônicas promissoras podem ser inviáveis para síntese experimental. Para essa avaliação, utiliza-se a energia acima do invólucro convexo (*energy above hull*, ΔE_{hull}), disponibilizada pelo Materials Project [Horton et al. 2025].

Materiais com $\Delta E_{hull} = 0$ são termodinamicamente estáveis, enquanto compostos com $\Delta E_{hull} < 0,05$ eV/átomo são amplamente considerados potencialmente sintetizáveis e empregados como critério de triagem em pipelines para descoberta acelerada de materiais [Xie et al. 2023; Horton et al. 2025].

Neste trabalho, a energia acima do hull é utilizada em conjunto com o band gap, a simetria cristalográfica e a Pontuação Heurística de Priorização Orientada à SPDC ($SPDC_{est}$) compondo o processo de validação física multicritério aplicado aos candidatos gerados pelo CVAE- χ^2 .

3. DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

Trabalhos desenvolvidos anteriormente demonstrou que o modelo CVAE- χ^2 é capaz de gerar vetores sintéticos condicionados à faixa de band gap entre 2 e 4 eV, produzindo candidatos promissores para materiais NLO [Lopes et al. 2026; Lopes et al. 2025]. Entretanto, esses vetores representam apenas descritores químicos e não garantem viabilidade física, estabilidade termodinâmica, não centrosimetria ou potencial para SPDC.

Este trabalho investiga como selecionar, dentre os 1.000 vetores gerados, aqueles que atendem simultaneamente a esses critérios. Para isso, propõe-se um pipeline de priorização multicritério baseado

em dados do Materials Project, que integra band gap, estabilidade termodinâmica (ΔE_{hull}), simetria cristalográfica e uma Figura de Mérito Heurística para SPDC. Essa estratégia reduz drasticamente o número de candidatos para futuros cálculos por DFT, priorizando materiais com maior potencial para tecnologias quânticas.

3.1 Trabalhos Relacionados

Diversas abordagens de aprendizado de máquina vêm sendo empregadas para acelerar a descoberta de novos materiais. Ward et al. [Ward et al. 2018] desenvolveram o matminer, uma biblioteca para extração automatizada de descritores físico-químicos utilizada na construção de modelos preditivos para Ciência dos Materiais.

No contexto de materiais ópticos não lineares, Xie et al. [Xie et al. 2023] propuseram uma base de dados orientada por predição que integra aprendizado de máquina, cálculos de primeiros princípios e validação experimental para acelerar a descoberta de materiais NLO. Entretanto, sua abordagem permanece restrita à avaliação de materiais conhecidos.

Modelos generativos baseados em Autoencoders Variacionais Condicionais (CVAEs) também têm sido aplicados à Ciência dos Materiais. Matsunoshita et al. [Matsunoshita et al. 2023] utilizaram um CVAE para otimização de parâmetros de potenciais interatômicos, evidenciando o potencial desses modelos, embora sem abordar a geração e validação física de novos materiais.

Nas etapas anteriores desta pesquisa, apresentadas no SBCCQ 2026 e no WCQ 2025 [Lopes et al. 2026; Lopes et al. 2025], foi desenvolvido um pipeline baseado em *Random Forest*, matminer e CVAE- χ^2 para geração de vetores sintéticos condicionados ao band gap desejado. Apesar do elevado desempenho na geração direcionada, permaneceu em aberto a validação física dos candidatos produzidos.

O presente trabalho amplia essa abordagem ao incorporar uma etapa sistemática de validação física multicritério, integrando informações do Materials Project [Horton et al. 2025], estabilidade termodinâmica, simetria cristalográfica e uma Pontuação Heurística de Priorização Orientada à SPDC ($SPDC_{\text{est}}$). Dessa forma, estabelece um pipeline para priorização de candidatos destinados a futuras validações por DFT e síntese experimental.

Trabalho	IA Generativa	Geração de Novos Materiais	Band Gap	Estabilidade	Simetria	Priorização para DFT
Ward et al. (2018)	X	X	X	X	X	X
Xie et al. (2023)	X	X	✓	✓	✓	X
Matsunoshita et al. (2023)	✓	X	X	X	X	X
Lopes et al. (WCQ 2025)	✓	✓	✓	X	X	X
Este trabalho	✓	✓	✓	✓	✓	✓

Table I. Comparação entre trabalhos relacionados e a abordagem proposta.

4. PROPOSTA METODOLÓGICA

A metodologia deste trabalho parte dos 1.000 vetores sintéticos previamente gerados pelo modelo CVAE- χ^2 , condicionados à faixa de band gap de interesse para materiais ópticos não lineares [Lopes et al. 2026; Lopes et al. 2025]. Como o CVAE χ^2 opera sobre o espaço de descritores químicos, os candidatos gerados são representados por vetores candidatos sintéticos, identificados por códigos

sequenciais. Neste trabalho, mantém-se a nomenclatura ‘Cristal_CVAE’ seguida do número identificador do vetor, como em Cristal_CVAE_382. Ressalta-se que essa nomenclatura constitui apenas um identificador atribuído aos vetores candidatos sintéticos gerados pelo modelo e não implica que eles correspondam, nesta etapa, a cristais com composição química e estrutura cristalina explicitamente determinadas. As propriedades eletrônicas, termodinâmicas e cristalográficas utilizadas na validação são obtidas a partir do vizinho mais próximo identificado no espaço de descritores do Materials Project. Essa aproximação baseia-se na hipótese de que vetores próximos nesse espaço apresentam propriedades físico-químicas semelhantes, permitindo uma triagem inicial antes da realização de cálculos por DFT.

A partir desse conjunto inicial, aplica-se uma sequência de filtros físicos e cristalográficos: inicialmente, são selecionados os vetores com band gap entre 2 e 4 eV; em seguida, são mantidos apenas os candidatos termodinamicamente estáveis, com energia acima do hull no intervalo $0 \leq \Delta E_{hull} < 0.05$ eV/átomo; posteriormente, são selecionados apenas os materiais não centrossimétricos. Por fim, calcula-se uma pontuação heurística de priorização orientada à SPDC e os candidatos remanescentes são comparados com cristais NLO de referência disponíveis no mercado.

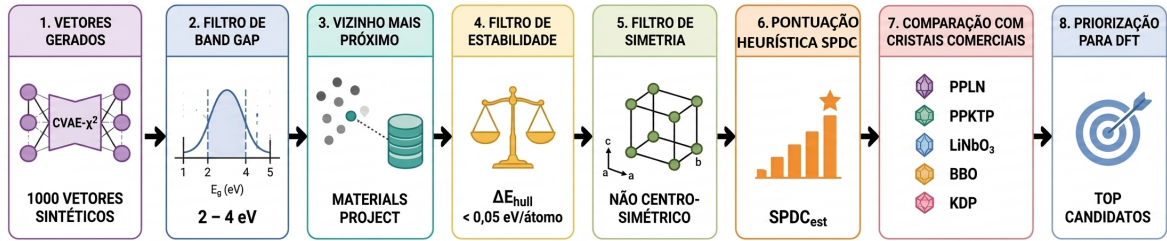


Fig. 1. Pipeline metodológico para validação física dos vetores gerados por CVAE- χ^2 .

4.1 Etapas do Pipeline

- 1) Conjunto inicial de vetores: O processo inicia-se com os 1.000 vetores sintéticos gerados pelo CVAE- χ^2 na etapa anterior da pesquisa. Esses vetores representam candidatos a materiais NLO condicionados ao band gap alvo.
- 2) Filtro de band gap: São mantidos apenas os candidatos cujo band gap previsto está entre 2 e 4 eV, faixa adotada neste trabalho como região de interesse para aplicações em SPDC.

$$2 \leq E_g \leq 4 \text{ eV} \quad (3)$$

- 3) Filtro de estabilidade: Em seguida, Os candidatos são avaliados quanto à estabilidade termodinâmica utilizando a energia acima do hull do material mais semelhante identificado no Materials Project, empregada como aproximação para estimar a estabilidade física do vetor sintético. Permanecem apenas os materiais com no intervalo de 0 a 0,05 eV/átomo.

$$0 \leq \Delta E_{hull} < 0.05 \text{ eV/átomo} \quad (4)$$

- 4) Filtro de não centrossimetria: Os candidatos restantes são filtrados de acordo com o grupo espacial, mantendo-se apenas estruturas não centrossimétricas, condição necessária para resposta óptica não linear de segunda ordem.
- 5) Pontuação $SPDC_{est}$: Para os materiais aprovados nos filtros anteriores, calcula-se uma pontuação estimada para SPDC, considerando simultaneamente propriedades associadas à transparência óptica, estabilidade e potencial resposta não linear.
- 6) Comparação com cristais de mercado: Por fim, os candidatos são comparados com cristais NLO de referência, como PPLN, PPKTP, $LiNbO_3$, BBO e KDP, permitindo avaliar se os materiais gerados apresentam desempenho competitivo em relação a cristais já utilizados em aplicações ópticas.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O pipeline proposto foi aplicado aos 1.000 vetores sintéticos previamente gerados pelo modelo CVAE- χ^2 [Lopes et al. 2026; Lopes et al. 2025]. A validação física foi realizada de forma sequencial, de modo que cada etapa utilizou apenas os candidatos aprovados na etapa anterior.

Inicialmente, foram selecionados os candidatos cujo band gap previsto encontrava-se na faixa de 2 a 4 eV. Dos 1.000 vetores gerados, 651 satisfizeram esse primeiro critério, correspondendo a 65,1% do conjunto inicial. Em seguida, esses 651 candidatos foram submetidos ao filtro de estabilidade termodinâmica utilizando a energia acima do hull do material mais semelhante recuperado via API do Materials Project [Horton et al. 2025]. Essa propriedade foi empregada como aproximação para estimar a estabilidade física dos vetores sintéticos gerados pelo CVAE- χ^2 . Apenas 41 materiais apresentaram valores no intervalo $0 \leq \Delta E_{\text{hull}} < 0.05$ eV/átomo, indicando potencial viabilidade de síntese.

Por fim, os 41 materiais estáveis foram analisados quanto à simetria cristalográfica. Após a aplicação sequencial dos critérios de triagem, apenas um vetor candidato sintético permaneceu, sendo identificado pela nomenclatura adotada neste trabalho como Cristal_CVAE_382. Esses resultados demonstram que, embora o modelo generativo seja eficiente na produção de candidatos com band gap desejado, a aplicação de filtros físicos sucessivos reduz significativamente o conjunto de materiais, evidenciando a importância da validação física multicritério antes da realização de cálculos de primeiros princípios.

Etapa	Candidatos	Percentual em relação à etapa anterior	Percentual acumulado
Vetores gerados pelo CVAE- χ^2	1000	–	100,0%
Band gap entre 2 e 4 eV	651	65,1%	65,1%
Estáveis ($0 \leq \Delta E_{\text{hull}} < 0,05$)	41	6,3%	4,1%
Não centrossimétricos	1	2,4%	0,1%

Table II. Resultados da aplicação sequencial do pipeline de priorização.

5.1 Avaliação da Pontuação Heurística SPDC

Após a identificação do único candidato remanescente após a triagem de plausibilidade física, foi calculada uma pontuação heurística de priorização orientada à SPDC. Essa métrica foi proposta com o objetivo de priorizar materiais candidatos antes da realização de cálculos de primeiros princípios, combinando simultaneamente informações eletrônicas e termodinâmicas. A pontuação é definida por:

$$SPDC_{\text{est}} = \frac{f(E_g)}{1 + 20\Delta E_{\text{hull}}} \quad (5)$$

em que

$$f(E_g) = \exp\left(-\frac{(E_g - 3)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (6)$$

considerando

$$\sigma = 0.5 \quad (7)$$

Essa função atribui maior pontuação a materiais cujo band gap esteja próximo de 3 eV, valor adotado como referência por representar aproximadamente o centro da janela de interesse (2–4 eV). Já o denominador penaliza materiais com maior energia acima do hull, favorecendo candidatos termodinamicamente mais estáveis. Dessa forma, a métrica combina, em uma única figura de mérito, dois dos principais critérios utilizados na seleção de materiais NLO para aplicações em SPDC.

5.2 Comparação com Cristais Não-Lineares Comerciais

A Figura 2 apresenta a comparação entre o $SPDC_{est}$ do Cristal_CVAE_382 e cinco cristais NLO amplamente utilizados como referência em aplicações de conversão paramétrica descendente espontânea (SPDC): PPLN, PPKTP, $LiNbO_3$, BBO e KDP. Neste trabalho, o $SPDC_{est}$ corresponde a uma Pontuação Heurística de Priorização Orientada à SPDC, proposta para priorizar candidatos promissores antes da realização de cálculos de primeiros princípios. Essa métrica combina a proximidade do band gap em relação ao valor alvo (3 eV) e a estabilidade termodinâmica, representada pela energia acima do hull, fornecendo uma estimativa do potencial do material para aplicações em SPDC.

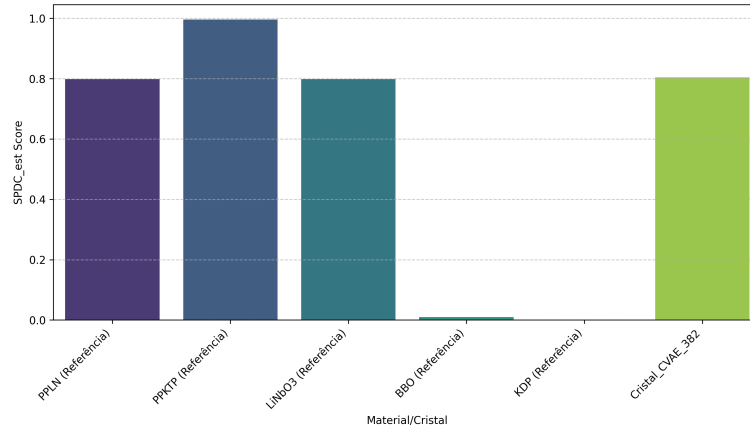


Fig. 2. Comparação da Pontuação Heurística de Priorização Orientada à SPDC ($SPDC_{est}$) entre o candidato gerado pelo CVAE- χ^2 e cristais NLO de referência.

Conforme a Figura 2, o Cristal_382 apresentou $SPDC_{est} = 0,8043$, pontuação heurística superior às de BBO e KDP e comparável às de PPLN e $LiNbO_3$, segundo o mesmo critério de priorização. Essa comparação restringe-se à Pontuação Heurística de Priorização Orientada à SPDC ($SPDC_{est}$) e não implica desempenho óptico não linear ou eficiência SPDC equivalentes, pois não foram avaliadas propriedades fundamentais como suscetibilidade óptica não linear de segunda ordem (χ^2), coeficiente não linear efetivo, índices de refração, dispersão e condições de casamento de fase. Os resultados reforçam o potencial da metodologia como ferramenta de triagem para descoberta acelerada de materiais NLO, reduzindo o espaço de busca e direcionando cálculos de DFT aos candidatos mais promissores.

6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi apresentado um pipeline orientado por modelo generativo para priorização multi-critério de candidatos a materiais NLO, complementando a etapa de geração anterior [Lopes et al. 2026; Lopes et al. 2025]. O pipeline integra critérios eletrônicos (band gap), termodinâmicos (ΔE_{hull}) e cristalográficos (não centrosimetria), reduzindo o conjunto inicial de 1.000 vetores a um único candidato consistente (Cristal_CVAE_382). A comparação com cristais NLO comerciais mostrou desempenho competitivo segundo a Figura de Mérito Heurística para SPDC, evidenciando o potencial da abordagem como ferramenta de triagem para direcionar futuros cálculos por DFT.

Os próximos passos da pesquisa em andamento envolvem a validação dos candidatos por meio de cálculos de DFT e a extensão da abordagem para modelos generativos capazes de produzir diretamente composições químicas e estruturas cristalinas, combinados com métodos de otimização combinatória.

Agradecimentos

Os autores integram o subgrupo de Computação Quântica do grupo de pesquisa em "Algoritmos, Otimização, Inteligência e Complexidade Computacional" (ALGOX) do Programa de Pós-Graduação em Informática da UFAM e do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), bem como o Instituto de Pesquisas da Amazônia (IPEAM) e também integram a Rede IATQ (Projeto Pró-Defesa V em Inteligência Artificial e Tecnologias Quânticas) e o INCT MATERIA - "Materiais Avançados à base de Terras Raras: Inovações e Aplicações". A pesquisa foi realizada com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES-PROEX) – Código de Financiamento 001, bem como financiada parcialmente pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Amazonas (FAPEAM), por meio dos projetos DPG-CAPES, POSGRAD 2025-2026 e POSGRAD 2026-2027.

REFERENCES

- BOYD, R. W. *Nonlinear Optics*. Academic Press, London, United Kingdom, 2020.
- HORTON, M. K., HUCK, P., YANG, R. X., ET AL. Accelerated data-driven materials science with the materials project. *Nature Materials* vol. 24, pp. 1522–1532, 2025.
- KINGMA, D. P. AND WELLING, M. Auto-encoding variational bayes, 2022.
- KWIAT, P. G., WAKS, E., WHITE, A. G., APPELBAUM, I., AND EBERHARD, P. H. Ultrabright source of polarization-entangled photons. *Physical Review A* 60 (2): R773–R776, Aug., 1999.
- LOPES, A., SANTOS, C. E., AND FREITAS, R. Uma abordagem com autoencoders variacionais condicionais para geração de materiais nlo com bandgap alvo. In *Anais do I Simpósio Brasileiro de Computação e Comunicação Quânticas*. SBC, Porto Alegre, RS, Brasil, pp. 164–175, 2026.
- LOPES, A., SANTOS, C. E. D. S., AND FREITAS-RODRIGUES, R. D. Geração de materiais nlo para computação quântica usando aprendizado de máquina. In *Anais do <WECIQ/WCQ>: Workshop-Escola de Computação e Informação Quântica e Workshop de Computação Quântica - UFSC*. Even3, Florianópolis, Brasil, 2025.
- MATSUNOSHITA, K., YAMAGUCHI, Y., HAMAIE, M., HORIBE, M., TANIBATA, N., TAKEDA, H., NAKAYAMA, M., KARASUYAMA, M., AND KOBAYASHI, R. Optimization of force-field potential parameters using conditional variational autoencoder. *Science and Technology of Advanced Materials: Methods* 3 (1): 2253713, 2023.
- SANCHEZ-LENGELING, B. AND ASPURU-GUZZIK, A. Inverse molecular design using machine learning: Generative models for matter engineering. *Science* 361 (6400): 360–365, 2018.
- SOHN, K., LEE, H., AND YAN, X. Learning structured output representation using deep conditional generative models. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, C. Cortes, N. Lawrence, D. Lee, M. Sugiyama, and R. Garnett (Eds.). Vol. 28. Curran Associates, Inc., 2015.
- WARD, L., DUNN, A., FAGHANINIA, A., ZIMMERMANN, N. E., BAJAJ, S., WANG, Q., MONTAYA, J., CHEN, J., BYSTROM, K., DYLLA, M., CHARD, K., ASTA, M., PERSSON, K. A., SNYDER, G. J., FOSTER, I., AND JAIN, A. Matminer: An open source toolkit for materials data mining. *Computational Materials Science* vol. 152, pp. 60–69, 2018.
- XIE, C., TIKHONOV, E., CHU, D., ET AL. A prediction-driven database to enable rapid discovery of nonlinear optical materials. *Science China Materials* vol. 66, pp. 4473–4479, 2023.