**Сравнительный анализ нейронных сетей на кристаллическом графе: исследование экспериментальной базы данных двумерных перовскитоподобных материалов**

***Дудаков И.В.1,2, Королев В.В.1,2, Митрофанов А.А.1,2***

*Студент, 4 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
институт искусственного интеллекта, Москва, Россия*

*2Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* *i.dudakov@iai.msu.ru*

Двумерные (2D) гибридные перовскитоподобные материалы представляют собой класс органо-неорганических слоистых структур, которые являются производными от структурного типа перовскита. Этот класс материалов обладает высокой структурной вариативностью, что открывает перспективы для разработки инновационных материалов для фотовольтаики и оптоэлектроники. Анализ кристаллических структур и их свойств, а также атомистическое моделирование требуют наличия курируемых баз данных, в то время как расчет физико-химических свойств для соединений, представленных в таких базах данных предполагает наличие высокопроизводительных вычислительных методов – машинного обучения. Целью работы является создание курируемой, расчетной базы данных кристаллических структур 2D перовскитоподобных материалов и обучение существующих моделей глубокого обучения для прогнозирования их свойств.

Экспериментальные кристаллические структуры были собраны из литературных источников. База данных содержит 509 структур, из которых 189 имеют экспериментальное значение ширины запрещенной зоны. Кристаллическая структура была оптимизирована на теоретическом уровне GGA–DFT; также была рассчитана зонная структура оптимизированных структур. Результаты расчетов DFT были использованы в качестве источника данных для обучения серии моделей глубокого обучения, предназначенных для прогнозирования важных термодинамических и электронных свойств, включая энергию образования, энергию над выпуклой оболочкой, ширину запрещенной зоны и эффективные массы носителей заряда.

Для прогнозирования экспериментальных и рассчитанных методом DFT свойств материалов использовались нейронные сети на кристаллическом графе. Был обучен ряд моделей (CGCNN, MEGNet, deeperGATGNN, ALIGNN, MATFormer, coGN и CartNet), которые отличаются количеством обучаемых параметров, подходом к построению кристаллического графа и набором учитываемых геометрических признаков.

Модели были обучены с использованием метода кросс-валидации для корректной оценки обобщающей способности путем последовательного тестирования на всем доступном наборе данных. Эффективность предсказаний моделей была оценена для различных свойств веществ (ширина запрещенной зоны, энергия образования и т.д.). Наименьшие значения средней абсолютной ошибки предсказаний для ширины запрещенной зоны показали модели MEGNet и ALIGNN – 0.23 и 0.25 эВ для расчетных и экспериментальных значений; для энергии образования и энергии над выпуклой оболочкой лучшими оказались модели CartNet и coGN – 8.4 и 9.6 мэВ/атом, соответственно.