**Иерархическая модель жидкокристаллической системы   
на основе нейронных сетей**

***Мацеевич С.В.1, Емельяненко А.В 2***

*Аспирант, 2 год обучения*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: cvmac@mail.ru*

Индустрия жидких кристаллов (ЖК) в данный момент развивается особенно быстро. В 2017 году группами Нишикавы и Манделя были экспериментально получены новые жидкокристаллические материалы – сегнетоэлектрические нематиками DIO и RM734, являющиеся полярными нематическими ЖК. Важной особенностью сегнетоэлектрических ЖК является наличие у них сегнетоэлектрической фазы с гигантской диэлектрической анизотропией, а также антисегнетоэлектрической фазы. Нематические сегнетоэлектрики, в отличие от смектических, не обладают низкой устойчивостью к механическим воздействиям, что делает подобный тип ЖК невероятно перспективным для практического применения для больших и прочных графических экранов.

Проблема поиска новых ЖК, обладающих подобными свойствами, является крайне существенной. Существующие методы имеют свои недостатки, которые могут быть нейтрализованы новым современным направлением изучения физических систем - машинного обучения. В настоящей работе предлагается иерархическая модель ЖК-системы, объединяющая в себе несколько подходов, основанная на использовании нейронных сетей [1].

Как известно из полуэмпирического метода Аскадского А.А., макроскапические параметры полимерных и ЖК молекул могут быть определены исходя из их химического состава [2]. В частности, формула для расчёта температуры стеклования Tст, оперирующая исключительно Ван-дер-Ваальсовыми объёмами химических элементов в молекуле, обеспечивает погрешность оценки не более 8%. Кроме того, методы хемоинформатики показали, что на основе физико-химических дескрипторов возможно прогнозирование с достаточно высокой точностью макроскопических свойств различных химических структур [3].

Поскольку ключевые особенности полярных ЖК можно обнаружить оптическими методами, предлагается сформировать иерархию геометрических дескрипторов: уровень атомов – координаты атомов, уровень молекул – парный потенциал взаимодействия, уровень группы молекул – директор (вектор) и уровень расплава – сплей. В качестве исходных и выходных данных предлагается брать данные, полученные методом компьютерного моделирования для уравновешенных ЖК систем. В качестве нейронных сетей предлагается использовать графовые нейронные сети для обработки нерегулярных данных (уровень атомов) и свёрточные нейронные сети (остальные уровни) для выделения локальных признаков. Использование данной иерархической модели позволит ускорить поиск новых полярных нематических ЖК.

**Литература**

1. Queen, O., McCarver, G.A., Thatigotla, S. et al. Polymer graph neural networks for multitask property learning. npj Comput Mater 9, 90 (2023). https://doi.org/10.1038/s41524-023-01034-3

2. Аскадский А. А., Расчетные способы определения физических характеристик полимеров, Усп. хим., 46:6 (1977), 1122–1151; Russian Chem. Reviews, 46:6 (1977), 589–601

3. Lo YC, Rensi SE, Torng W, Altman RB. Machine learning in chemoinformatics and drug discovery. Drug Discov Today. 2018 Aug;23(8):1538-1546. doi: 10.1016/j.drudis.2018.05.010. Epub 2018 May 8. PMID: 29750902; PMCID: PMC6078794.