**Предсказание адсорбции у металлоорганических каркасов (MOF)**

**по кристаллической структуре с использованием графовых нейронных сетей и трансформеров**

***­Тужаров Е.И.1, Пупеза А. К.2***

*1Студент, 6 курс специалитета*

*2аспирант 3-его года обучения*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: egor.tuzharov@chemistry.msu.ru*

Металлоорганические каркасы (Metal-Organic Frameworks, MOF) - это класс пористых кристаллических материалов, состоящих из металлических узлов и органических лигандов1. Благодаря рекордной удельной поверхности и возможности тонкой настройки пор они привлекают значительный интерес в задачах сорбции газов и жидкостей. В частности, MOF рассматриваются как перспективные материалы для хранения водорода и метана, улавливания углекислого газа и разделения газовых смесей2. Химическое пространство MOF фактически безгранично благодаря вариациям металл-ионов, органических линкеров и топологий. Это ведёт к проблеме быстрого поиска оптимальных структур для конкретных приложений. В данном контексте задача предсказания адсорбционных свойств MOF является актуальной, поскольку такие прогнозы позволяют приоритетно отбирать наиболее перспективные каркасы для синтеза и экспериментальной проверки.

Графовые нейронные сети хорошо подходят для кристаллических материалов, в том числе MOF, поскольку естественным образом представляют структуру в виде графа: атомы соответствуют узлам, а связи - рёбрам. Модель CGCNN (Crystal Graph Convolutional Neural Network)3 продемонстрировала высокую точность в предсказаниях свойств кристаллов. Для MOF это значит, что сеть способна уловить ключевые структурные особенности, влияющие на адсорбцию. Графовые трансформеры, совмещающие идею графовых свёрток и слоёв внимания. В частности, Chen и соавторы4 показали, что графовый трансформер способен одновременно улавливать локальные и дальнодействующие связи, что повышает точность прогнозирования адсорбции по сравнению с классическими GNN.

Мы разработали гибридную модель, сочетающую графовую нейронную сеть и механизм самовнимания (трансформер). На вход подаются координаты и типы атомов, по которым строится граф. Далее GNN-энкодер извлекает локальные признаки, а трансформер анализирует их с помощью слоёв самовнимания, фокусируясь на ключевых аспектах структуры. Выходом служит предсказанная адсорбционная ёмкость при заданных условиях (температура, давление). Полученная модель показала высокую точность на отложенной выборке. MAE для адсорбции CO2 при 0,1 МПа сократилось на 30% по сравнению с референсными GNN без трансформера. Механизм внимания позволил интерпретировать вклад отдельных атомных узлов и фрагментов каркаса в способность материала поглощать газ.

**Литература**

1. Zhou, H.-C.; Long, J. R.; Yaghi, O. M. Introduction to metal–organic frameworks. Chem. Rev. 2012, 112(2), 673–674.

2. Ahmed, A. et al. Exceptional hydrogen storage achieved by screening nearly half a million metal–organic frameworks. Nat. Commun. 2019, 10, 1568.

3. Xie, T.; Grossman, J. C. Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. Phys. Rev. Lett. 2018, 120, 145301.

4. Chen, P. et al. Interpretable Graph Transformer Network for Predicting Adsorption Isotherms of MOFs. J. Chem. Inf. Model. 2022, 62(22), 5446–5456.