

# Факультет компьютерных наук



Исследовательский индивидуальный проект:

## Предсказания структуры и свойств материалов

Materials Structure Prediction and its Properties

Автор:

Карлинский Георгий, БПМИ218

Руководитель:

Лазарев Михаил, научный сотрудник,  
ФКН НИУ ВШЭ

# Предметная область



Двумерные кристаллы MoS<sub>2</sub> и их характеристики (энергия формации и HOMO-LUMO gap). Алгоритмы предсказания этих характеристик.

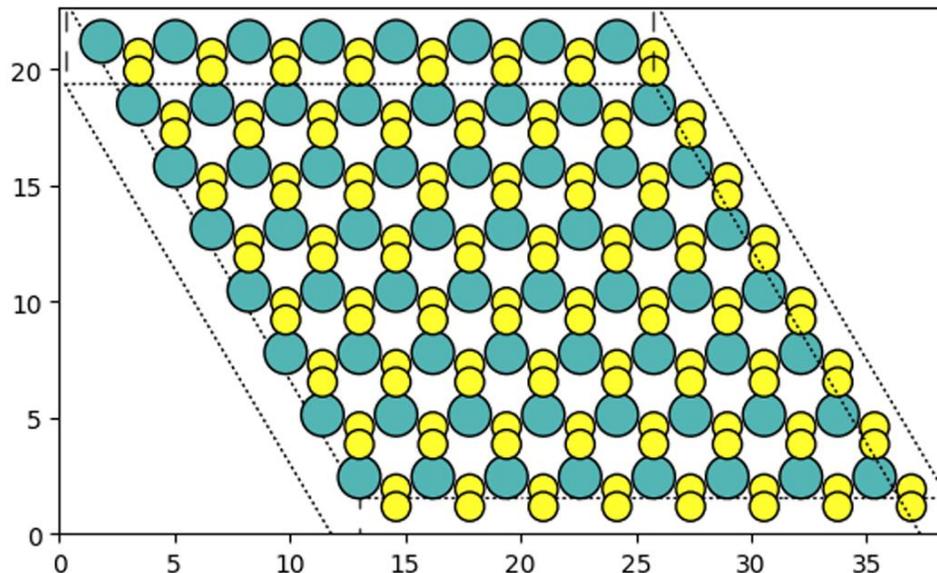


Рис. 2.1: Кристаллическая решетка MoS<sub>2</sub> размера (8, 8, 1).

# Актуальность работы

---



Отсутствие точных и эффективных методов предсказания структуры двумерных кристаллов с определенными характеристиками



Ценность кристаллов с локальными дефектами



Необратимость методов предсказания характеристик



Разница в сложности измерения характеристик кристалла (например, точного положения дефектов структуры против оптических характеристик)

# Цель и задачи проекта



## Цель:

Алгоритмы генерации структуры новых материалов и по заданным свойствам

## Задачи:

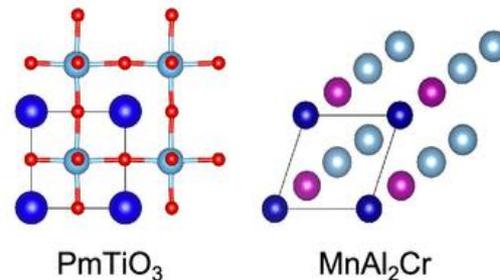
- Использование классических архитектур и решений для генерации двумерных материалов
- Использование символьной регрессии в построении структуры дефектов в материала по заданным свойствам

# Существующие подходы

## Генерация структур с помощью обучения представлений

Система глубокого обучения представлений для создания новых 3D-структур неорганических кристаллов, которая также предсказывает значения восьми связанных свойств. [3]

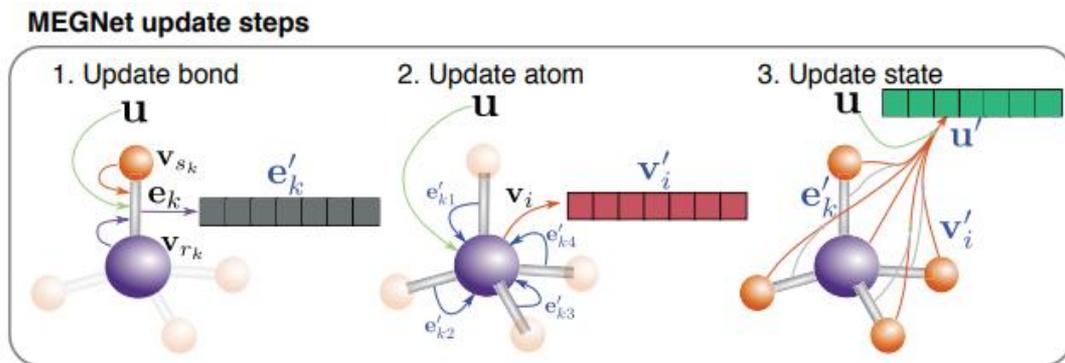
При генерации по заданным характеристикам, 6% структур оказались в области 20% ошибки от необходимой энергии формации, при предсказании характеристик сгенерированных структур с помощью CGCNN.



# Существующие подходы

## Предсказание характеристик кристалла с помощью графовой нейронной сети. (MEGNet)

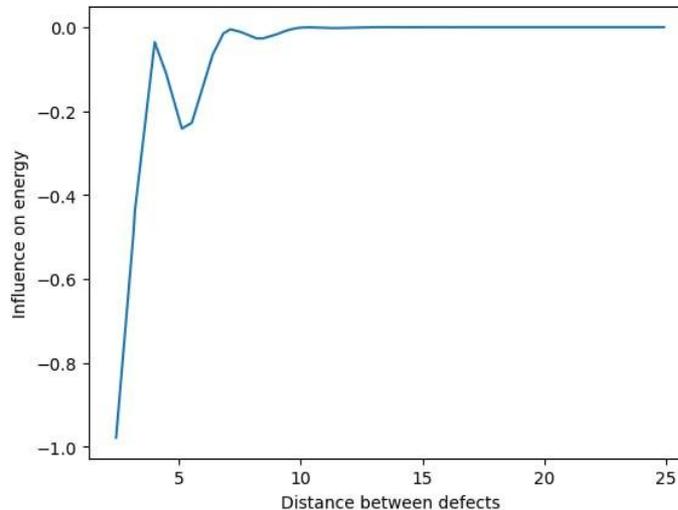
Основная идея данного подхода в том, чтобы рассматривать структуру кристалла как графовую нейронную сеть. Итеративно обновляются внутренние представления атомов в решетке, связей и общего состояния чтобы в конечном итоге получить новое представление, по которому с помощью полносвязных слоев предсказывают характеристики изначального кристалла с высокой точностью. Модель обучалась на QM9.



# Используемые подходы

## Предсказание характеристик кристалла с помощью символьной регрессии.

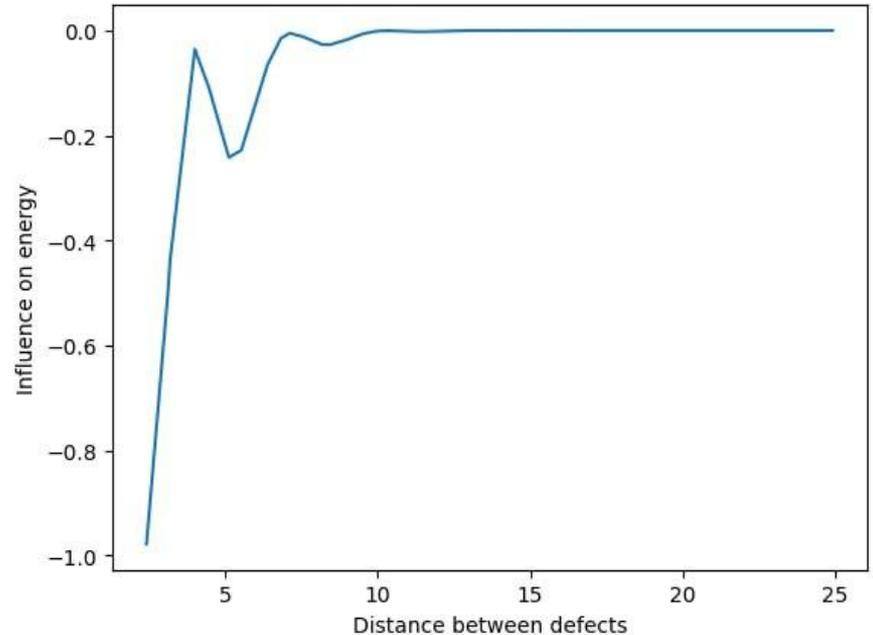
Если рассматривать попарные взаимодействия, то можно обучить символьную регрессию[6] предсказывать влияние попарных взаимодействий между дефектами в решетке для получения быстрого метода подсчета характеристик.



Пример графика формулы попарных взаимодействий для значений энергии формации от расстояния между дефектами

# Выбор методов

- Формулы попарных взаимодействий
- Фиксируем виды и количество дефектов
- Эволюционный алгоритм



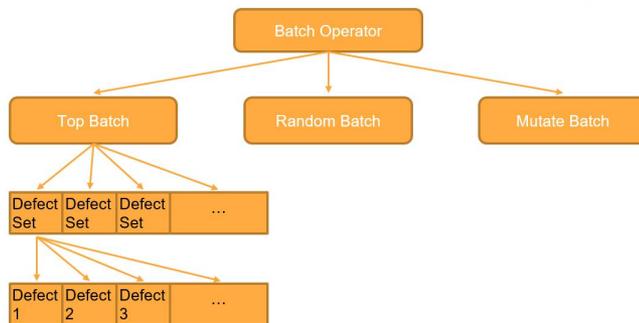
# Описание методов

Можно добиться вменяемо оптимального результата характеристик расстановки дефектов путём малых итеративных преобразований расстановки.

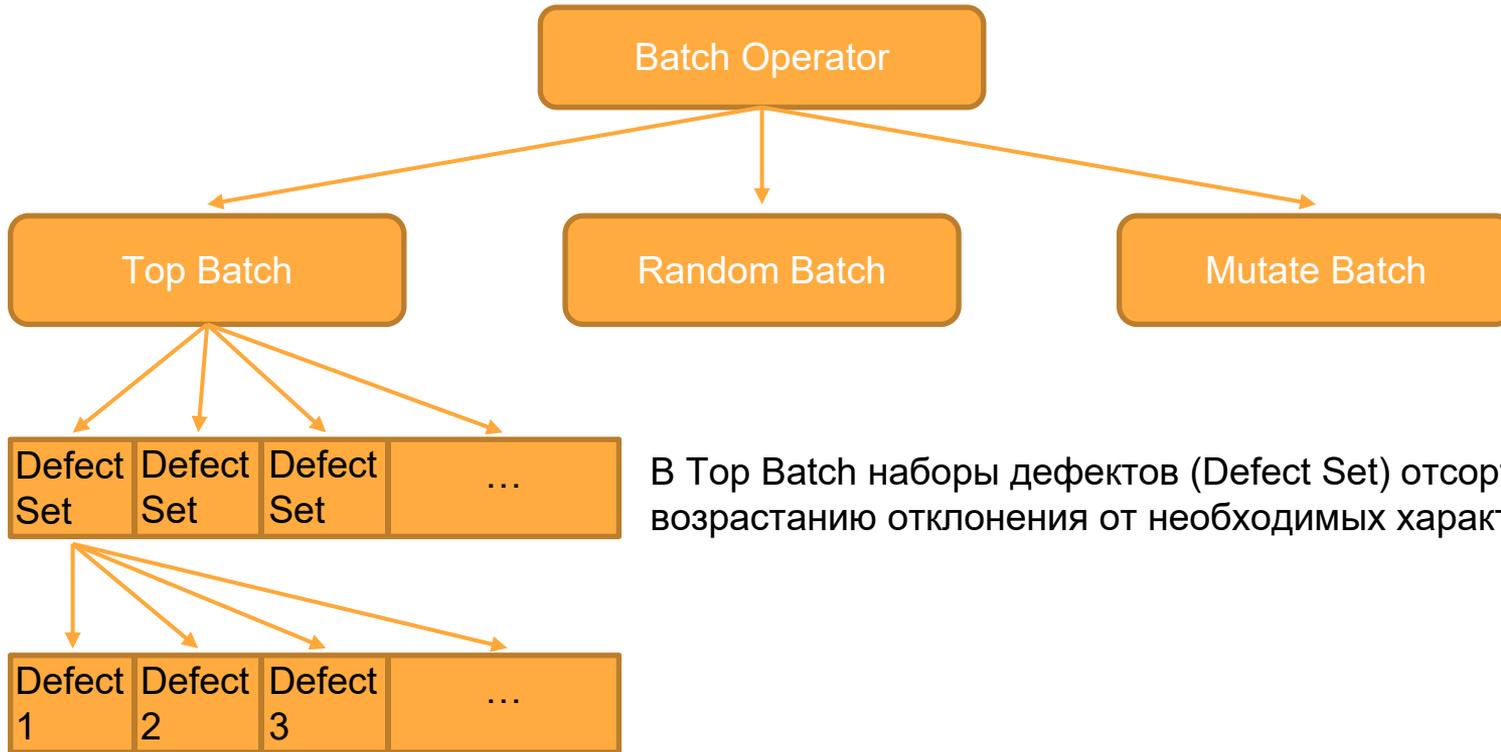
Причины:

- относительная простота функций
- скорость расчета

Будем держать текущую «популяцию» из наборов дефектов, видоизменять некоторым образом каждый из наборов в популяции, а после оставлять некоторую подвыборку наборов для формирования следующей популяции.



# Архитектура метода

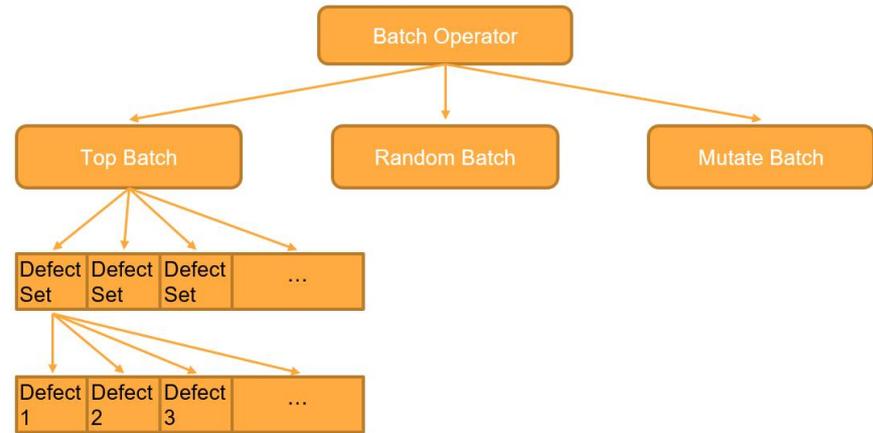


В Top Batch наборы дефектов (Defect Set) отсортированы по возрастанию отклонения от необходимых характеристик.

# Архитектура метода

Оператор принимает список наборов дефектов и отправляет его в батчи, каждый из которых сам решает, какие наборы оставить.

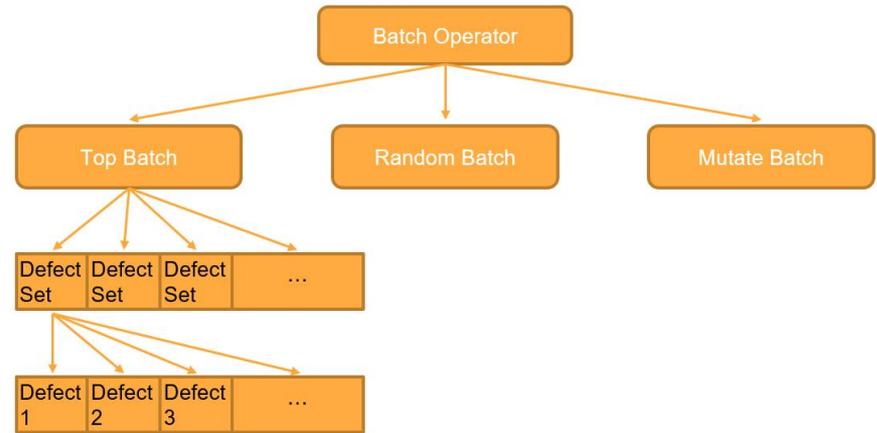
- Top Batch оставляет  $n_t$  самых близких к необходимым характеристикам.
- Random Batch оставляет  $n_r$  случайных наборов.
- Mutate Batch работает как Top Batch, но применяет операцию мутации, которая случайным образом изменяет наборы.



# Архитектура метода

Алгоритм:

1. Сгенерируем несколько случайных расстановок дефектов, добавим их в оператор.
2. Теперь будем брать расстановки от оператора, двигать случайный дефект на 1 позицию во всех направлениях и для каждого из направлений создавать новую конфигурацию.
3. Отправим все полученные расстановки обратно в оператор.
4. Возвращаемся в пункт 2.

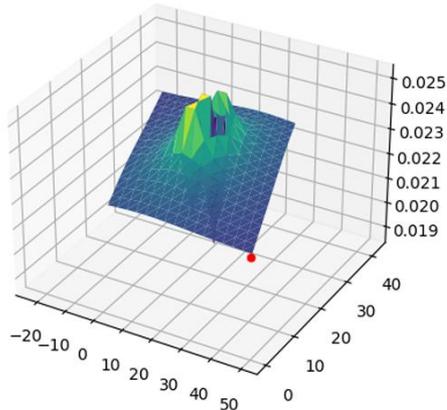


Для энергии формации алгоритм сходится за 15 итераций. Получение одной сооптимизированной решетки занимает полторы секунды.

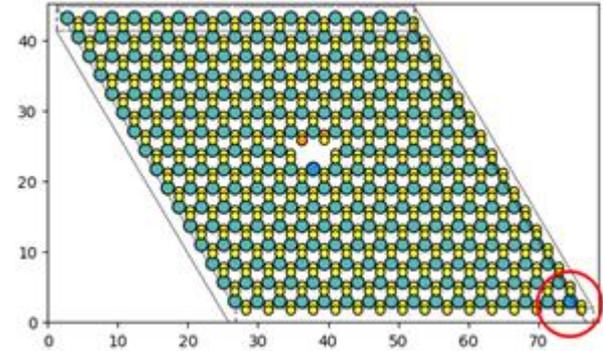
# Архитектура метода

В процессе нахождения решеток с минимальной энергией формации было обнаружено следующее:

В оптимальной расстановке дефектов по решетке минимальную энергию имеет один кластер дефектов. Однако, из-за некоторых взаимодействий дефектов один или несколько могли оказаться вне кластера, при том, что любое движение на адекватно-небольшое расстояние приводило к



(с) 3Д версия графика 4.2b. Красным отмечена начальная точка.



увеличению энергии формации (как видно на 3д графике, в центре глубокий минимум, однако дефект (красная точка) застрял в своём локальном минимуме).

Был добавлен дополнительный шаг в конце алгоритма, который жадно перераспределяет дефекты по одному. Если запускать такой шаг без начальной оптимизации, качество снижается. Оптимизация после жадного шага не увеличивает точность.

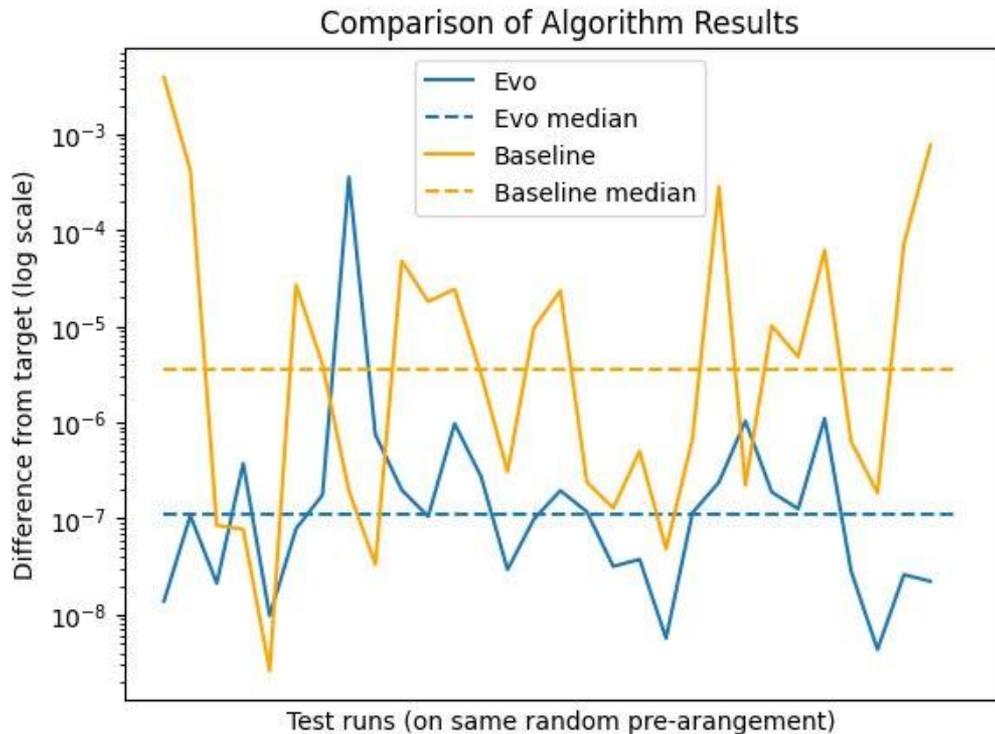
# Основные результаты и выводы

В результате данной работы был создан подход для конструирования дефектов в кристаллах MoS<sub>2</sub> по желаемым характеристикам, благодаря созданной системе дискретной оптимизации.

Система была протестирована на создании конфигураций дефектов для необходимых энергий формации с внушительной точностью.

Тем самым, точность метода остается зависимой лишь от способов аппроксимации характеристик кристалла с дефектами.

Метод итеративной оптимизации конфигурации дефектов себя оправдал.



# Дальнейшая работа



- Добавить больше характеристик, по которым будет производиться генерация конфигурации дефектов в кристалле
- Создать новые виды батчей для более эффективного эволюционного алгоритма
- Испытать систему на новых кристаллах и других видах дефектов
- Найти новые способы вычисления характеристик кристаллов по их структуре и внедрить их в систему

# ИСТОЧНИКИ

- [1] Chi Chen, Weike Ye, Yunxing Zuo, Chen Zheng и Shyue Ping Ong. “Graph Networks as a Universal Machine Learning Framework for Molecules and Crystals”. В: Chemistry of Materials (2019), pp. 3564–3572.
- [2] P.K.Chow и et al. “Defect-induced photoluminescence in monolayer semiconducting transition metal dichalcogenides.” В: ACS Nano 9 (2015), с. 1520–1527.
- [3] Callum J. Court, Batuhan Yildirim, Apoorv Jain и Jacqueline M. Cole. “3-D Inorganic Crystal Structure Generation and Property Prediction via Representation Learning”. В: Journal of Chemical Information and Modeling 60.10 (2020)
- [4] Pengru Huang, Ruslan Lukin, Maxim Faleev, Nikita Kazeev, Abdalaziz Rashid Al-Maeni, Daria V. Andreeva, Andrey Ustyuzhanin, Alexander Tormasov, A. H. Castro Neto и Kostya S. Novoselov. “Unveiling the complex structure-property correlation of defects in 2D materials based on high throughput datasets”. В: npj 2D Materials and Applications 7.1 (февр. 2023), с. 6.
- [5] Abdalaziz Rashid, Mikhail Lazarev, Nikita Kazeev, Kostya Novoselov и Andrey Ustyuzhanin. “Review on automated 2D material design”. В: 2d Mater. (май 2024).
- [6] Popov S, Lazarev M, Belavin V, Derkach D и Ustyuzhanin A. “Symbolic expression generation via variational auto-encoder”. В: PeerJ Comput. Sci. 9 (март 2023), e1241.
- [7] S. Tongay и et al. “Defects activated photoluminescence in two-dimensional semiconductors: Interplay between bound, charged, and free excitons.” В: Sci. Rep. 3 (2013), с. 1–5.
- [8] T. T. Tran, K. Bray, M. J. Ford, M. Toth и I. Aharonovich. “Quantum emission from hexagonal boron nitride monolayers.” В: Nat. Nanotechnol. 11 (2016), с. 37–41.
- [9] F. Xia, H. Wang, D. Xiao, M. Dubey и A. Ramasubramaniam. “Two-dimensional material nanophotonics.” В: Nat. Photonics 8 (2014), с. 899–907.