

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ПРОЦЕССА ГЕНЕРАЦИИ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ В МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСАХ**Жолобов Д.В. (ИТМО), Ширококов В.П. (ИТМО), Мезенов Ю.А. (ИТМО)****Научный руководитель – доктор физико-математических наук Миличко В.А.****(Университет ИТМО, Университет Лотарингии)**

Введение. Металл-органические каркасы (МОК) - материалы, кристаллическая решётка которых состоит из ионов металлов и органических линкеров. В последние несколько десятилетий МОК стали представлять научный интерес за счёт наличия у них ряда химических и физических свойств, которые позволяют применять МОК в качестве сенсоров, катализаторов и для адресной доставки лекарств [1]. Многие МОК имеют пористую структуру, что позволило успешно использовать некоторые из этих кристаллов в задачах хранения газов [2-3]. Высокое структурное и химическое разнообразие МОК является причиной, по которой число потенциально доступных для синтеза материалов считается практически неограниченным [4]. Поэтому определение их свойств при помощи компьютерных симуляций и моделей машинного обучения всё чаще используется для поиска структур, обладающих желаемыми свойствами [5-6]. Помимо этого, ведутся и исследования о применимости МОК в тех задачах материаловедения, где другие классы материалов уже хорошо себя зарекомендовали [7].

Одной из таких задач является генерация второй гармоники - процесс удвоения частоты лазерного излучения при его прохождении через кристалл. Материалы с нелинейными оптическими свойствами широко используются для преобразования частот лазерного излучения в медицине, телекоммуникациях и биологии [8-9]. Как правило, эти материалы не предоставляют большого контроля над эффективностью процесса генерации второй гармоники [10]. Это делает многие коммерчески доступные кристаллы с нелинейными свойствами малоприспособленными в тех областях, где требуются миниатюрные источники излучения, модуляторы и сенсоры. Поэтому актуальной научной задачей является поиск новых материалов, которые способны генерировать вторую гармонику с хорошей эффективностью и позволяют управлять этим процессом [11-12]. Хотя эффективность генерации второй гармоники для отдельных МОК уже исследовалась экспериментально [13] и были обнаружены отдельные материалы, подходящие для задач нанофотоники [14], для подавляющего большинства этих кристаллов ещё не проводился анализ этой характеристики.

Основная часть. В рамках этой научной работы была поставлена задача обнаружения МОК с высокой эффективностью генерации второй гармоники при помощи машинного обучения. Для этого был составлен набор данных по второй гармонике на основе информации из нескольких научных статей. В получившемся наборе присутствуют данные как об экспериментальных измерениях МОК, так и о характеристиках кристаллов из других классов веществ, которые были получены при помощи симуляций с использованием теории функционала плотности. Затем был выполнен подбор оптимальной архитектуры графовой нейронной сети для дообучения на этом ограниченном наборе данных. Модель с наилучшими характеристиками затем была использована для оценки эффективности второй гармоники для большого набора МОК из базы данных QMOF.

Выводы. Полученные оценки позволяют выделить несколько МОК, которые являются потенциальными материалами с высокими показателями эффективности второй гармоники. В дальнейшем планируется выполнить проверку свойств этих МОК при помощи компьютерного моделирования и экспериментов.

Список использованных источников:

1. J. Park et al. From Data to Discovery: Recent Trends of Machine Learning in Metal–Organic Frameworks // JACS Au. – 2024. – Vol. 4, no. 10. – P. 3727–3743.
2. B. Li et al. Porous Metal–Organic Frameworks: Promising Materials for Methane Storage // Chem. – 2016. – Vol. 1, no. 4. – P. 557–580.
3. S. S. Kaye et al. Impact of Preparation and Handling on the Hydrogen Storage Properties of $\text{Zn}_4\text{O}(\text{1,4-benzenedicarboxylate})_3$ (MOF-5) // J. Am. Chem. Soc. – 2007. – Vol. 129, no. 46. – P. 14176–14177.
4. H. Demir et al. Recent advances in computational modeling of MOFs: From molecular simulations to machine learning // Coord. Chem. Rev. – 2023. – Vol. 484. – P. 215112.
5. G. Borboudakis et al. Chemically intuited, large-scale screening of MOFs by machine learning techniques // npj Comput. Mater. – 2017. – Vol. 3, no. 40. – P. 1–7.
6. A. S. Rosen et al. Machine learning the quantum-chemical properties of metal–organic frameworks for accelerated materials discovery // Matter. – 2021. – Vol. 4, no. 5. – P. 1578–1597.
7. D. Li et al. Advances and Applications of Metal–Organic Frameworks (MOFs) in Emerging Technologies: A Comprehensive Review // Global Challenges. – 2023. – Vol. 8, no. 2. – P. 2300244.
8. F. Liang et al. Mid-Infrared Nonlinear Optical Materials Based on Metal Chalcogenides: Structure–Property Relationship // Cryst. Growth Des. – 2017. – Vol. 17, no. 4. – P. 2254–2289.
9. S. K. Chandran et al. Recent Advances in Infrared Nonlinear Optical Crystal // Crystal Growth and Chirality - Technologies and Applications. – IntechOpen, 12/2022.
10. S. Chen et al. Gigantic electric-field-induced second harmonic generation from an organic conjugated polymer enhanced by a band-edge effect // Light Sci. Appl. – 2019. – Vol. 8, no. 17. – P. 1–6.
11. K. Yao et al. Enhanced tunable second harmonic generation from twistable interfaces and vertical superlattices in boron nitride homostructures // Sci. Adv. – 2021. – Vol. 7, no. 10.
12. M. Zhao et al. Atomically phase-matched second-harmonic generation in a 2D crystal // Light Sci. Appl. – 2016. – Vol. 5, no. 8.
13. C. Wang et al. Rational Synthesis of Noncentrosymmetric Metal–Organic Frameworks for Second-Order Nonlinear Optics // Chem. Rev. – 2012. – Vol. 112, no. 2. – P. 1084–1104.
14. Z. Chen et al. Giant Enhancement of Second Harmonic Generation Accompanied by the Structural Transformation of 7-Fold to 8-Fold Interpenetrated Metal–Organic Frameworks (MOFs) // Angew. Chem. Int. Ed. – 2019. – Vol. 59, no. 2. – P. 833–838.