

УДК 538.911

## **ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ПОИСКА МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСОВ СО СТРУКТУРНЫМИ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ**

**Широбоков В.П.** (Университет ИТМО), **Карсаков Г.В.** (Университет ИТМО)

**Научный руководитель – кандидат физико-математических наук Миличко В.А.**  
(Университет ИТМО, Университет Лотарингии)

Металл-органические каркасы (МОК, англ. metal-organic frameworks - MOF) представляют собой кристаллические материалы, в которых ионы/кластеры металлов и органические лиганды объединены в упорядоченную сеть координационных связей [1]. Множество металлов и органических лигандов могут использоваться как «строительные блоки» для синтеза MOF благодаря чему образуют почти бесчисленное количество комбинации. Более того, выполняя функционализацию лигандов, изменяя взаимодействие металла - лиганда, встраивая гостевые молекулы, изменяя внешние условия (температура [2,3], давление [5,6], электрическое [7] и магнитное поле [8], свет [9], сольвент [10,11]) можно контролировать физические и химические свойства материала такие как размер пор, поверхностную энергию, каталитическую активность [13].

Структуры с фазовыми переходами, полученные на основе анализа базы данных с помощью машинного обучения (англ. Machine Learning - ML), потенциально способны найти применение в будущих девайсах для хранения и записи информации, газовых датчиков, фотоники, эффективных мембранах для сепарации газов и жидкостей.

Возможности для MOF практически безграничны, поскольку всегда можно спроектировать и сконструировать MOF, который наилучшим образом подходит для интересующего применения.

Внедрение высокопроизводительных машин для моделирования структур привело к огромным изменениям в исследовании MOF. Данные о десятках тысяч MOF могут быть легко получены с помощью молекулярного моделирования с разумной точностью. MOF, рассматриваемые для различных применений, больше не ограничиваются экспериментально синтезированными структурами. Такие изменения, однако, также создали новые сложности, поскольку накопление больших моделируемых данных для MOF показало, что простой анализ данных больше не является продуктивным. Кроме того, даже при наличии лучшего высокопроизводительного вычислительного оборудования, становится неэффективной стратегия выполнения анализа методом перебора для выявления нескольких, наиболее эффективных MOF [14].

В настоящее время все больше в научных исследованиях используют машинное обучение от открытия лекарств [15] и геномики [16] к оптимизации дизайна органических полупроводников и проводящих 2D материалов [17, 18].

Безграничное пространство дизайна MOF существенно расширяет спектр полезных объектов для перспективных применений, но его огромность также усложняет его систематическое изучение. В свою очередь, методы ML используются для выявления скрытых и сложных тенденций в больших объемах данных, которые могут быть решающими для понимания зависимости структура-свойство. Кроме того, из того огромного числа MOF, машинное обучение может эффективно идентифицировать структуры, с наилучшей производительностью для интересующих приложений [19].

В данной работе продемонстрирована база данных MOF, демонстрирующих изменение пространственной группы внутри одной кристаллической системы или изменение пространственной группы с изменением одной кристаллической системы под действием внешних стимулов (температуры, давления, сольвента, света, электрического и магнитного поля). Данная база данных, в отличие от похожих баз данных MOF (QMOF, CoRE-MOF),

обладает важной особенностью, напрямую показывая структурные переходы. Данная база данных была использована для обучения нейронной сети. В качестве архитектуры нейронной сети был использован вариационный автоэнкодер, который показал наилучшую точность на тестовых данных. В дальнейшем, данную базу данных и модель нейросети можно улучшать, добавляя данные и дообучая нейросеть.

#### Список использованных источников:

1. Horike S., Shimomura S., Kitagawa S. Soft porous crystals //Nature chemistry. – 2009. – Т. 1. – №. 9. – С. 695-704.
2. Zhu M. et al. A Temperature-Responsive Smart Europium Metal-Organic Framework Switch for Reversible Capture and Release of Intrinsic Eu<sup>3+</sup> Ions //Advanced Science. – 2015. – Т. 2. – №. 4. – С. 1500012.
3. Meng W. et al. An elastic metal–organic crystal with a densely catenated backbone //Nature. – 2021. – Т. 598. – №. 7880. – С. 298-303.
4. Hazra A. et al. CO<sub>2</sub>-induced single-crystal to single-crystal transformations of an interpenetrated flexible MOF explained by in situ crystallographic analysis and molecular modeling //Chemical science. – 2019. – Т. 10. – №. 43. – С. 10018-10024.
5. Viswanathan M. High-pressure phase transitions with group–subgroup disagreement in metal guanidinium formates //CrystEngComm. – 2018. – Т. 20. – №. 43. – С. 6861-6866.
6. Knebel A. et al. Defibrillation of soft porous metal-organic frameworks with electric fields //Science. – 2017. – Т. 358. – №. 6361. – С. 347-351.
7. Maćzka M. et al. Phase transitions and coexistence of magnetic and electric orders in the methylhydrazinium metal formate frameworks //Chemistry of Materials. – 2017. – Т. 29. – №. 5. – С. 2264-2275.
8. Yanai N. et al. Guest-to-host transmission of structural changes for stimuli-responsive adsorption property //Journal of the American Chemical Society. – 2012. – Т. 134. – №. 10. – С. 4501-4504.
9. Bumstead A. M. et al. Modulator-Controlled Synthesis of Microporous STA-26, an Interpenetrated 8, 3-Connected Zirconium MOF with the *t*-Topology, and its Reversible Lattice Shift //Chemistry—A European Journal. – 2018. – Т. 24. – №. 23. – С. 6115-6126.
10. Ding B. et al. A series of multi-dimensional metal–organic frameworks with trans-4, 4'-azo-1, 2, 4-triazole: polymorphism, guest induced single-crystal-to-single-crystal transformation and solvatochromism //CrystEngComm. – 2015. – Т. 17. – №. 29. – С. 5396-5409.
11. Ohkoshi S. et al. Light-induced spin-crossover magnet //Nature chemistry. – 2011. – Т. 3. – №. 7. – С. 564-569.
12. Chong S. et al. Applications of machine learning in metal-organic frameworks //Coordination Chemistry Reviews. – 2020. – Т. 423. – С. 213487.
13. Lavecchia A. Machine-learning approaches in drug discovery: methods and applications //Drug discovery today. – 2015. – Т. 20. – №. 3. – С. 318-331.
14. Libbrecht M. W., Noble W. S. Machine learning applications in genetics and genomics //Nature Reviews Genetics. – 2015. – Т. 16. – №. 6. – С. 321-332.
15. Rajan A. C. et al. Machine-learning-assisted accurate band gap predictions of functionalized MXene //Chemistry of Materials. – 2018. – Т. 30. – №. 12. – С. 4031-4038.
16. Kunkel C. et al. Finding the right bricks for molecular legos: A data mining approach to organic semiconductor design //Chemistry of Materials. – 2019. – Т. 31. – №. 3. – С. 969-978.
17. Bartók A. P. et al. Machine learning unifies the modeling of materials and molecules //Science advances. – 2017. – Т. 3. – №. 12. – С. e1701816.

Широбоков В.П. (автор)

Подпись

Миличко В.А. (научный руководитель)

Подпись

