

УДК 538.911

## СОЗДАНИЕ МОДЕЛИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МЕТАЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСАХ

Карсаков Г.В. (ИТМО), Широбокров В.П. (ИТМО)

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

**Введение.** Металл-органические каркасы (МОК, англ. Metal-Organic Frameworks - MOF) являются кристаллическими материалами, образующимися путем соединения ионов или кластеров металла с органическими соединениями через координационные связи. Они обладают большой площадью поверхности, разнообразным составом, пористостью и развитой химией пор, что делает MOF перспективными пористыми материалами для сорбции газов, разделения, катализа и фотоники [1]. Более того, сформированная из различных органических и неорганических строительных блоков, связанных слабыми и сильными химическими взаимодействиями, структура MOF может сильно варьироваться. Количество комбинаций структур может достигать вплоть до миллиардов [2], из которых экспериментально зафиксированы только 100 000 [3]. Таким образом, поиск оптимальной структуры MOF для конкретного применения остается актуальным вопросом. В этом смысле подходы машинного обучения (англ. Machine Learning - ML) и глубокого обучения позволяют прогнозировать новые (или искать) MOF для эффективного разделения опасных газов, поглощения метана [4], катализа [5] и даже фотоники (посредством настройки ширины запрещенной зоны). Однако последнее не ограничивается простым нахождением оптимальной ширины запрещенной зоны MOF для использования их в качестве фотодетекторов [6], но может быть расширено до области материалов с фазовым переходом [7] для различных физических/химических применений. Например, MOF с настраиваемой структурой реализуют управляемое разделение газов [8], фильтрацию [9] и обработку/хранение данных [10], что делает их новым классом материалов для фазовых превращений. Тем не менее, прогнозирование и поиск MOF с настраиваемой структурой по-прежнему являются сложной задачей.

**Основная часть.** В работе мы использовали ML подход для выявления MOF, обладающих фазовым переходом, что является примером настройки структуры твердого тела. На основе доступной базы данных [11] мы создали и обучили автоэнкодер (англ. AutoEncoder - AE) с последующим обучением классификаторов на уникальной базе данных с экспериментально подтвержденным фазовым переходом. Это позволило как идентифицировать доступные MOF с высоким потенциалом для демонстрации фазового перехода, так и разделить их на те, которые могут испытывать его под действием гостевых молекул или при изменении температуры/давления. Наконец, мы обсудили доступные MOF, отобранные нашей моделью, и рассмотрели их структурные особенности. Полученные результаты, таким образом, открывают новую возможность прогнозирования и поиска MOF в качестве новых материалов с фазовым переходом для различных физических/химических применений.

**Выводы.** Мы разработали модель машинного обучения для обнаружения металл-органических каркасов, которые демонстрируют фазовый переход под действием гостевых молекул или изменений температуры/давления. Используя открытую базу данных, мы обучили модель AE для уменьшения размерности пространства признаков. На основе нашей уникальной базы данных и обученного AE мы получили вектора уменьшенной размерности, которые использовали для классификации MOF на основе их уникальных свойств, подтвержденных экспериментально. Это позволило выявить MOF с высоким потенциалом фазовых переходов и классифицировать по типу воздействия на них. В результате был составлен список перспективных MOF для практического применения в различных физических и химических процессах.

#### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ:

1. Cui Y. et al. Photonic functional metal–organic frameworks //Chemical Society Reviews. – 2018. – Т. 47. – №. 15. – С. 5740-5785.
2. Lee S. et al. Computational screening of trillions of metal–organic frameworks for high-performance methane storage //ACS Applied Materials & Interfaces. – 2021. – Т. 13. – №. 20. – С. 23647-23654.
3. Moghadam P. Z. et al. Development of a Cambridge Structural Database subset: a collection of metal–organic frameworks for past, present, and future //Chemistry of Materials. – 2017. – Т. 29. – №. 7. – С. 2618-2625.
4. Boyd P. G. et al. Data-driven design of metal–organic frameworks for wet flue gas CO<sub>2</sub> capture //Nature. – 2019. – Т. 576. – №. 7786. – С. 253-256.
5. Pardakhti M. et al. Machine learning using combined structural and chemical descriptors for prediction of methane adsorption performance of metal organic frameworks (MOFs) //ACS combinatorial science. – 2017. – Т. 19. – №. 10. – С. 640-645.
6. Arora H. et al. Demonstration of a broadband photodetector based on a two-dimensional metal–organic framework //Advanced Materials. – 2020. – Т. 32. – №. 9. – С. 1907063.
7. Zhang W. et al. Designing crystallization in phase-change materials for universal memory and neuro-inspired computing //Nature Reviews Materials. – 2019. – Т. 4. – №. 3. – С. 150-168.
8. Liu J. et al. Smart covalent organic networks (CONs) with “on-off-on” light-switchable pores for molecular separation //Science advances. – 2020. – Т. 6. – №. 34. – С. eabb3188.
9. Ou R. et al. A sunlight-responsive metal–organic framework system for sustainable water desalination //Nature Sustainability. – 2020. – Т. 3. – №. 12. – С. 1052-1058.
10. Kulachenkov N. et al. MOF-Based Sustainable Memory Devices //Advanced Functional Materials. – 2022. – Т. 32. – №. 5. – С. 2107949.
11. Rosen A. S. et al. Machine learning the quantum-chemical properties of metal–organic frameworks for accelerated materials discovery //Matter. – 2021. – Т. 4. – №. 5. – С. 1578-1597.

Карсаков Г. В. (автор)

Подпись

Миличко В. А. (научный руководитель) Подпись