

АНАЛИЗ ПРИМЕНЕНИЯ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВОЙСТВ НОВЫХ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСОВ**Иванов Д.А.** (Университет ИТМО), **Широбоков В.П.** (Университет ИТМО)**Научный руководитель – доктор физико-математических наук Миличко В.А.**
(Университет ИТМО, Университет Лотарингии)

Введение. Металл-органические каркасы (МОК) — это кристаллические материалы, образующиеся через координационные связи путем соединения ионов или кластеров металла с органическими молекулами. Они обладают пористостью, большой площадью поверхности, адсорбцией. Более того, изменяя взаимодействие металла — лиганда путём изменения внешних условий (температура [1], электрическое [2] и магнитное [3] поле, свет [4], давление [5]), а также встраивая гостевые молекулы, можно влиять на физические и химические свойства МОК, как механические величины (коэффициент Пуассона, модуль объёмного сжатия, модуль сдвига) [6], поверхностную энергию, каталитическую активность [7], что делает МОК привлекательными и для промышленных решений. Список свойств МОК не ограничивается написанным выше, а возможность их тонкой настройки привлекательна для решения задач доставки лекарств [7], детектирования и сорбции газов [8], а также в развитии компьютерных расчётов на памяти (in-memory computing) [9]. На данный момент было синтезировано порядка ста тысяч МОК [10], в то время как полное количество оценивается миллиардами соединений [11]. Таким образом, поиск наиболее оптимальных структур МОК для конкретного применения остается актуальным вопросом. Поиск новых соединений осуществляется как экспериментально, так и при помощи численного моделирования (теория функционала плотности, молекулярная динамика). Однако, это полный перебор, который занимает много времени, ресурсов и далек от оптимального решения. Способом решения данной проблемы является использование искусственного интеллекта (ИИ). В данной работе проведён анализ методов решения проблемы прогнозирования свойств новых МОК при помощи методов ИИ. В этом тезисе представлены наиболее актуальные на данный момент способы ускорения предсказания свойств новых МОК, а также указаны области их применения.

Основная часть. Помощником в обработке экспериментальных баз данных с МОК являются языковые модели на базе ChatGPT [12], хотя они сильно ограничены в обрабатываемых токенах. Подобные алгоритмы можно использовать и для предсказания свойств новых соединений. Ещё одним способом выступают социальные сети [13]. В них заложена возможность предсказания возможности встраивания гостевых молекул в новые соединения. Для исследования химического пространства в целях поиска сепарации газов могут подойти инструменты обратного дизайна МОК в связке с генетическим алгоритмом [14] или с генеративно-состязательной сетью [15]. Для предсказания энергетических характеристик МОК как ширина запрещённой зоны и уровень Ферми стоит использовать графовые свёрточные нейронные сети [16]. В последнее время их применение расширилось до предсказания взаимодействия с газами (их хранение и поглощение, в перспективе и сепарация) [17]. Обобщает методы графовых нейронных сетей message passing neural network. Использование различных методов агрегации позволяет использовать графовые нейронные сети помимо уже описанных вариантов в т. ч. и для предсказания частичного заряда МОК [18].

Выводы. В данной работе был представлен анализ перспективных способов применения искусственного интеллекта для предсказания свойств МОК. Однако, идеи и методы, изложенные в данном анализе, можно использовать для предсказания как других семейств материалов, так и иных свойств этих материалов.

Список использованных источников:

1. Zhu M. et al. A Temperature-Responsive Smart Europium Metal-Organic Framework Switch for Reversible Capture and Release of Intrinsic Eu³⁺ Ions //Advanced Science. – 2015. – Т. 2. – №. 4. – С. 1500012.

2. Mączka M. et al. Phase transitions and coexistence of magnetic and electric orders in the methylhydrazinium metal formate frameworks //Chemistry of Materials. – 2017. – T. 29. – №. 5. – С. 2264-2275.
3. Yanai N. et al. Guest-to-host transmission of structural changes for stimuli-responsive adsorption property //Journal of the American Chemical Society. – 2012. – T. 134. – №. 10. – С. 4501-4504.
4. Bumstead A. M. et al. Modulator-Controlled Synthesis of Microporous STA-26, an Interpenetrated 8, 3-Connected Zirconium MOF with the the-i Topology, and its Reversible Lattice Shift //Chemistry–A European Journal. – 2018. – T. 24. – №. 23. – С. 6115-6126.
5. Viswanathan M. High-pressure phase transitions with group–subgroup disagreement in metal guanidinium formates //CrystEngComm. – 2018. – T. 20. – №. 43. – С. 6861-6866.
6. Feng, G., Jiang, X., Wei, W., Gong, P., Kang, L., Li, Z., Li, Y., Li, X., Wu, X., Lin, Z., Li, W., & Lu, P. (2016). High pressure behaviour and elastic properties of a dense inorganic–organic framework. Dalton Transactions (Cambridge, England: 2003), 45(10), 4303–4308.
7. Lavecchia A. Machine-learning approaches in drug discovery: methods and applications //Drug discovery today. – 2015. – T. 20. – №. 3. – С. 318-331.
8. Boyd P. G. et al. Data-driven design of metal–organic frameworks for wet flue gas CO₂ capture //Nature. – 2019. – T. 576. – №. 7786. – С. 253-256.
9. Bachinin, S. V., Marunchenko, A., Matchenya, I., Zhestkij, N., Shirobokov, V., Gunina, E., Novikov, A., Timofeeva, M., Povarov, S. A., Li, F., & Milichko, V. A. (2024). Metal-organic framework single crystal for in-memory neuromorphic computing with a light control. Communications Materials, 5(1), 1–9.
10. 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. – T. 29. – №. 7. – С. 2618-2625.
11. Lee S. et al. Computational screening of trillions of metal–organic frameworks for high-performance methane storage //ACS Applied Materials & Interfaces. – 2021. – T. 13. – №. 20. – С. 23647-23654.
12. Zheng, Z., Zhang, O., Borgs, C., Chayes, J. T., & Yaghi, O. M. (2023). ChatGPT chemistry assistant for text mining and the prediction of MOF synthesis. Journal of the American Chemical Society, 145(32), 18048–18062.
13. Jalali, M., Wonanke, A. D. D., & Wöll, C. (2023). MOFGalaxyNet: a social network analysis for predicting guest accessibility in metal–organic frameworks utilizing graph convolutional networks. Journal of Cheminformatics, 15(1).
14. Yao, Z., Sánchez-Lengeling, B., Bobbitt, N. S., Bucior, B. J., Kumar, S. G. H., Collins, S. P., Burns, T., Woo, T. K., Farha, O. K., Snurr, R. Q., & Aspuru-Guzik, A. (2021). Inverse design of nanoporous crystalline reticular materials with deep generative models. Nature Machine Intelligence, 3(1), 76–86.
15. Sanchez-Lengeling, B., & Aspuru-Guzik, A. (2018). Inverse molecular design using machine learning: Generative models for matter engineering. Science (New York, N.Y.), 361(6400), 360–365.
16. Xie, T., & Grossman, J. C. (2018). Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. Physical Review Letters, 120(14).
17. Lu, X., Xie, Z., Wu, X., Li, M., & Cai, W. (2022). Hydrogen storage metal-organic framework classification models based on crystal graph convolutional neural networks. Chemical Engineering Science, 259(117813), 117813.
18. Raza, A., Sturluson, A., Simon, C., & Fern, X. (2020). Message passing neural networks for partial charge assignment to metal-organic frameworks. In ChemRxiv.

Иванов Д.А. (автор)

Миличко В.П. (научный руководитель)