

## 機械学習を用いた Bi-S 結合を持つ新規 MOFs 合成条件の探索

(関西学院大学理工<sup>1</sup> JST さきがけ<sup>2</sup>)○柴原大樹<sup>1</sup> 鎌倉吉伸<sup>1</sup> 脇谷拓真<sup>1</sup> 小南隼人<sup>1</sup> 田中大輔<sup>1,2</sup>

Machine-Learning-Assisted Exploration of Synthesis Condition of Novel MOFs Containing Bi-S Bonds (<sup>1</sup>*School of Science and Technology, Kwansei Gakuin University*, <sup>2</sup>*JST PRESTO*)○ Hiroki Shibahara,<sup>1</sup> Yoshinobu Kamakura,<sup>1</sup> Takuma Wakiya,<sup>1</sup> Hayato Kominami,<sup>1</sup> Daisuke Tanaka,<sup>1,2</sup>

Metal-organic frameworks (MOFs) have attracted much attention as multifunctional materials. MOFs with sulfur-based ligands (S-MOFs) are expected to display the photocatalytic and semiconducting properties. In this study, we attempted to synthesize novel S-MOFs composed of Bi<sup>3+</sup> ion, and used machine learning technics to optimize the synthesis conditions. We synthesized Bi-S-MOFs under solvothermal conditions, and obtained powder samples. We evaluated the products by powder X-ray diffraction (PXRD) measurements, and automatically classified the patterns by cluster analysis. In addition, the relationship between the classification and the synthesis conditions was evaluated by decision tree learning to analyze the dominant factors in the synthesis. It is confirmed that PXRD pattern from novel unknown phase appeared under reaction temperature below 80°C and starting material concentrations above 300 mM (Figure. 1). We have demonstrated that cluster analysis and decision tree analysis are useful to explore synthesis conditions for novel MOFs.

**Keywords:** Metal-Organic Frameworks, Machine Learning, Sulfur-based ligands, Bismuth

金属-有機構造体(MOFs)は優れた細孔特性を持つ材料として注目されている。酸素系配位子を用いた MOFs の多くは絶縁体になってしまうのに対し、硫黄を配位元素として有する MOF は光触媒特性や半導体特性を示すことが報告されており、興味深い特性が期待できるが、その報告例は少ない。本研究では Bi<sup>3+</sup>イオンと硫黄系配位子から成る新規 MOFs の合成を試み、合成条件の最適化に機械学習の手法を用いた。合成物の評価を粉末 X 線回折測定、回折パターンの自動分類をクラスター分析で行い、その分類と合成条件の関係を決定木学習により評価し、合成における支配因子の解析を行った(Figure1)。決定木学習により、Bi の出発物質の種類によって生成物が異なることが確認できた。また、未知相は反応温度が 80 °C未満及び出発物質の金属濃度が 300 mM 以上の条件下で確認されることが明らかになった。このようにクラスタリング分析と決定木を組み合わせることで、効率的な合成条件探索を行うことが可能となることを実証した。

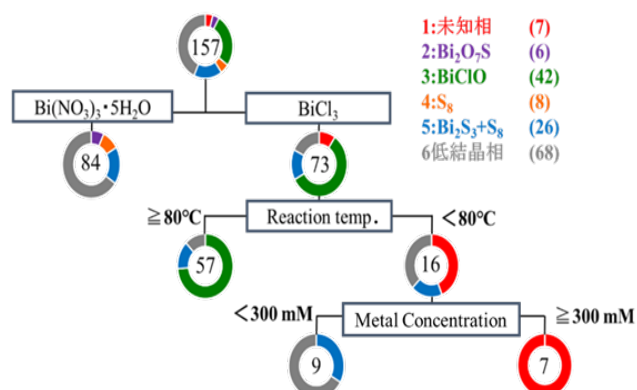


Figure 1. 157 条件に対して作成した決定木