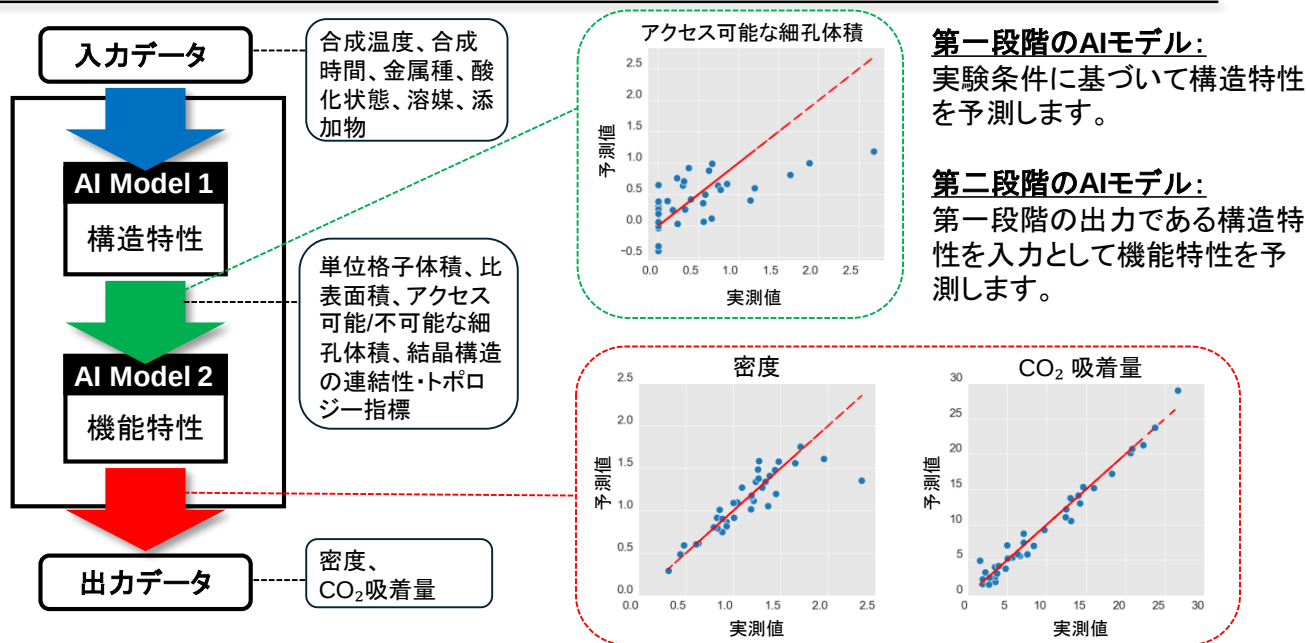


Multi-Sigma®を用いたMOF開発における目標密度制御と性能最大化の両立

株式会社エイゾスのAI解析プラットフォームMulti-Sigma®を用いて、金属有機構造体(MOF)の開発において、適切な密度と高いCO₂吸着性能を両立する材料の開発を行なった事例をご紹介します。

1. AI連鎖解析



2. 要因分析

合成条件の影響

- **合成時間 (17–20%):** 最も強い影響、特に長時間での制御が重要
- **合成温度 (16–19%):** 時間に次ぐ影響力、適切な温度域の選択が必須
- **酸化状態 (9–12%):** +2価が安定して良好な結果

構造特性の影響

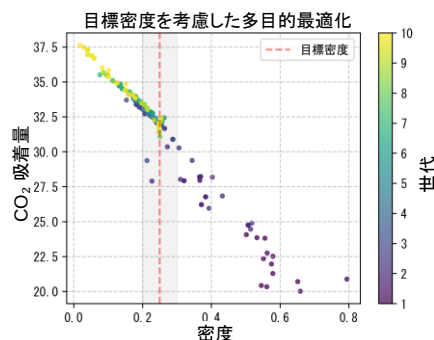
- CO₂吸着量: **比表面積と細孔体積**に強く依存
- 密度: **単位格子体積と結晶構造の連結性**に依存

3. 多目的最適化

Multi-Sigma®の最適化機能を用いて、密度の目標値を0.25 g/cm³とし、CO₂吸着量が最大化になるような多目的最適化を実行。その結果、密度が0.25±0.005 g/cm³で、CO₂吸着量が32.2の高性能を実現する下記の合成条件を発見。

(注) 密度が負にならないように制限を課すため、本事例では、0.25 g/cm³を密度の目標値として設定し最適化を実行。

- 合成温度: 174℃
- 合成時間: 408時間
- 金属種: インジウム
- 酸化状態: +2価



(注1) データ: Kaggle (<https://www.kaggle.com/datasets/marquis03/metal-organic-frame-materials-prediction/data>)

(注2) 各項目の単位は次のとおり。密度 (g/cm³)、アクセス可能な細孔体積 (cm³/g)

(注3) 温度298K、気圧16barでのCO₂吸着量

株式会社エイゾスは、Multi-Sigma®、AIコンサルティング、条件出し支援、受託研究開発などのAIサービスを提供しています。

Multi-Sigma®は、研究開発向けのクラウドAIソフトウェアで、実験の手間を大幅に削減し、最小限の実験データセットで研究者の実際の問題に対する革新的な解決策を見出す支援を可能とします。

〒305-0031 茨城県つくば市吾妻1-5-7
<https://aizoth.com/service/multi-sigma/>
info@aizoth.com

