**Разработка алгоритма поиска равновесной геометрии металлоорганических комплексов меди с использованием методов машинного обучения**

***Давлетшин А.А.***

*Студент, 4 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

*E–mail:* *alikDavletshin@gmail.com*

Металлоорганические комплексы меди играют ключевую роль в каталитических процессах, в медицинских целях для создания препаратов и таргетной терапии. Оптимизация геометрии комплексов играет важную роль в таких задачах, как разработка новых соединений и улучшение существующих. Однако определение их равновесной геометрии осложняется высокой гибкостью координационных связей и наличием множества локальных энергетических минимумов. Существующие методы, такие как Architector, требуют априорной информации о координационном окружении металла, что делает их ограниченными для новых комплексов. Актуальность работы заключается в разработке универсального подхода, позволяющего восстанавливать трёхмерные структуры комплексов меди исключительно на основе SMILES-лиганда и атома металла.

В работе предложен алгоритм, объединяющий байесовскую оптимизацию (Tree-structured Parzen Estimator, TPE) с нейросетевым межатомным потенциалом MACE. Для оценки энергии использована модель MACE-MP-0, дообученная на траекториях DFT-оптимизации комплексов меди (функционал PBE-D3, базис def2-SVP) и дополненная данными по органическим молекулам. Обучение включало структуры с одним атомом меди и одним лигандом, а также набор органических соединений для повышения точности описания межатомных взаимодействий. Алгоритм генерирует трёхмерные геометрии путём варьирования двугранных углов лиганда и пространственного положения атома меди относительно центра лиганда. Ключевым этапом является интеграция TPE, который направляет поиск в областях с минимальной энергией, и MACE, обеспечивающего быструю оценку энергетического ландшафта.

Было дообучено две версии модели MACE-MP-0, адаптированные для металлоорганических систем, а полная версия алгоритма, включающая финальную оптимизацию методом локальной оптимизации BFGS, протестирована на выбранных эталонных комплексах из базы данных tmQM. Результаты подтверждают возможность применения подхода для восстанавливать трёхмерные структуры комплексов.