**Параметризация полуэмпирического метода GFN1-xtb для f-элементов**

***Пикулин И.С., Карпов К.В.***

*Студент, 5 курс специалитета*

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

*E-mail:* [*pikulin.ivan@chemistry.msu.ru*](mailto:pikulin.ivan@chemistry.msu.ru)

Современные методы вычислительной химии играют ключевую роль в изучении свойств и реакционной способности различных химических веществ, включая f-элементы. В частности, полуэмпирический метод GFN1 семейства xTB [1] зарекомендовал себя как эффективный инструмент для предсказания энергетических характеристик молекул. Однако, данный метод был разработан и оптимизирован для s-, p- и d-элементов. В рамках данной работы проводится параметризация метода GFN1-xtb для расчета свойств химических соединений с f-элементами.

Предлагаемая схема оптимизации включает в себя перебор возможных комбинаций параметров с использованием метода TPE (Tree-structured Parzen Estimator) [2]. Этот метод позволяет учесть результаты предыдущих попыток и скорректировать дальнейший поиск на основании ошибки, полученной на предыдущих шагах.

Для оценки текущей погрешности метода используется изменение полной энергии в различных химических реакциях, которые сравниваются со значениями из базы данных HERDB [3], а также результаты оптимизации геометрии комплексов лантаноидов, которые сравниваются с геометриями из базы данных LnQM [4].

**Литература**

1. J. Chem. Theory Comput. 2017, 13, 5, 1989–2009, doi: 10.1021/acs.jctc.7b00118
2. James Bergstra, Rémi Bardenet et all, Algorithms for Hyper-Parameter Optimiza-tion, Curran Associates, Inc., 2011
3. Inorg. Chem. 2020, 59, 18, 13383–13389, doi: 10.1021/acs.inorgchem.0c01746
4. Inorg. Chem. 2017, 56, 20, 12485–12491, doi: 10.1021/acs.inorgchem.7b01950