

МАШИННО-ОБУЧАЕМЫЕ МЕЖАТОМНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ДЛЯ КООРДИНАЦИОННО-ОРГАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

П. П. Кобчикова

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

*E-mail: polinakob@jinr.ru

Машинно-обучаемые межатомные потенциалы (MLIP, Machine-Learned Interatomic Potentials) становятся всё более востребованными в задачах молекулярного моделирования, особенно когда речь идёт о структурно сложных и электронно неоднородных системах. В частности, системы, находящиеся на границе между координационной и органической химией — такие как комплексы фенантролина меди и индолные соединения, близкие по структуре к триптанам, — представляют собой важный класс объектов для применения MLIP. Их изучение актуально не только с фундаментальной точки зрения, но и в контексте биофизики, где подобные структуры используются как модельные системы для изучения молекулярного узнавания, координационной селективности и динамики связей в условиях, приближённых к биологическим средам.

Координационные комплексы с переходными металлами, включающие азотсодержащие лиганды (например, производные фенантролина), могут моделировать активные центры металлопротеинов или вмешиваться в их функции. Индолные производные, включая структуры, близкие к триптанам, демонстрируют структурную гибкость и способность к специфическому связыванию с биомолекулами, что делает их важными модельными системами при изучении взаимодействий «молекула–мишень» и конформационной адаптивности. Тонкая настройка геометрии и электронных свойств в этих системах определяет их биологическую активность, а значит, требует точных инструментов для их теоретического описания.

Классические межатомные потенциалы не способны адекватно описывать сложные проявления координации, изменения валентных состояний, делокализацию заряда и специфические слабые взаимодействия, критичные для биологически значимых состояний. В таких условиях MLIP, основанные на нейросетевых или графовых архитектурах (например, SchNet, NequIP, MACE), обучаются на высокоточных квантовохимических данных и демонстрируют способность воспроизводить потенциальную энергию и её производные с точностью, сопоставимой с методами *ab initio* [1].

Однако реализация MLIP в биофизически значимых координационных системах сопряжена с рядом методических вызовов. Необходимо учитывать широкий спектр возможных координационных состояний, чувствительность к окружению (включая водную среду и ионы), конформационную гибкость, множественность функциональных групп и сложную топологию молекул. Формирование репрезентативных обучающих выборок и обеспечение переноса моделей между системами разной природы остаются открытыми задачами [2]. Кроме того, важна интерпретируемость моделей — возможность сопоставления выходов MLIP с химически значимыми параметрами.

Таким образом, применение MLIP к системам типа фенантролин меди и триптаноподобных структур отвечает актуальному биофизическому запросу на точные и масштабируемые модели, способные описывать молекулы с гибкой структурой и богатой электронной природой в условиях, приближённых к биологическим.

1. J. Qi, T. W. Ko, B. C. Wood, T. A. Pham, S. P. Ong, *npj Comput. Mater.* **10**, 57 (2024).

2. M. Kulichenko, B. Nebgen, N. Lubbers et al., *Chem. Rev.* **124**, 13681 (2024).