

ПРЕДСКАЗАНИЕ БИЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ С УЧЁТОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛИГАНДОВ

Курбанов Д. А.¹, Сайфулина П. Р.¹, Арбуханова Г. А.¹, Креславская Т. Д.¹,
Научный руководитель — канд. хим. наук. Васильев Н. А.

¹Университет ИТМО

E-mail: kurbanov_d@scamt-itmo.ru

Введение

Во многих задачах координационной химии при анализе и прогнозировании характеристик билигандных комплексов используется предположение об аддитивности вкладов отдельных компонентов системы, согласно которому итоговый отклик комплекса может быть представлен как сумма независимых вкладов металлического центра и двух лигандов.

Свойства координационных соединений, содержащих металл и несколько лигандов, во многих случаях не подчиняются принципу аддитивности. Для билигандных комплексов вклад каждого лиганда в итоговое свойство системы может существенно зависеть от природы второго лиганда, что приводит к возникновению неаддитивных и эмерджентных эффектов. Наличие таких эффектов значительно усложняет рациональный дизайн соединений и снижает применимость классических эмпирических и полуэмпирических подходов.

В последние годы методы машинного обучения активно применяются для анализа и предсказания свойств химических систем. Однако большинство существующих моделей опирается на индивидуальные характеристики компонентов и не учитывает особенности их совместного взаимодействия, что ограничивает качество прогнозов для сложных координационных комплексов.

Основная часть

В работе предложен подход машинного обучения для предсказания свойств билигандных комплексов железа с явным учётом неаддитивных взаимодействий между лигандами. Комплексы рассматриваются как трёхкомпонентные системы, включающие металлический центр и два лиганда.

Для описания структуры лигандов использовались молекулярные эмбединги, полученные на основе их химического строения. Векторное представление комплекса формировалось путём объединения эмбедингов отдельных компонентов с дополнительными признаками взаимодействия, отражающими различие и согласованность их химических свойств. Такой способ представления позволяет модели учитывать не только индивидуальные характеристики лигандов, но и особенности их совместного влияния на свойства комплекса.

Построенные модели решали задачу бинарной классификации. Качество оценивалось с использованием метрик ROC-AUC и полноты (recall) на кросс-валидации

и независимой тестовой выборке. Полученные результаты сравнивались с моделями, использующими только индивидуальные дескрипторы компонентов без признаков взаимодействия.

Выводы

Показано, что использование комбинированных векторных представлений, включающих признаки взаимодействия между лигандами, приводит к существенному повышению качества предсказаний по сравнению с аддитивными моделями. Полученные результаты подтверждают значимую роль неаддитивных эффектов в формировании свойств билигандных комплексов железа.

Предложенный подход может быть использован для предварительного *in silico*-отбора перспективных систем с последующей экспериментальной проверкой, а также применён к другим классам координационных соединений. Это создаёт основу для более рационального дизайна функциональных металлокомплексов и оптимизации экспериментальных исследований.

Литература

1. The SCDBASE — Structural Coordination Database [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <https://www.acadsoft.co.uk/scdbase/scdbase.htm> (дата обращения: 2026).
2. Butler K. T., Davies D. W., Cartwright H., Isayev O., Walsh A. Machine learning for molecular and materials science // *Nature*. 2018. Vol. 559. P. 547–555.