**Оценка значимости явного учёта эффекта поляризации в эмпирических методах расчёта зарядов**

***Фролов В.С.,*** ***Палюлин В.А.,*** ***Шульга Д.А., Шаймарданов А.Р.***

*Студент, 6 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: frol.vit99@gmail.com*

Эмпирические методы расчёта зарядов являются быстрыми, хотя и приближёнными, способами воспроизведения зарядовой плотности молекул. Последовательное повышение точности зарядов достигается добавлением учёта различных физически осмысленных поправок (“электронных эффектов”) в описание. Ранее была выявлена естественная иерархия вкладов эффектов по важности [1]. В настоящее время ведутся исследования по явному учёту различных вкладов, в том числе эффекта поляризации [2]. При этом важно принимать во внимание корректность используемого описания и место данного эффекта среди других.

В рамках работы был предложен метод ДРЭО+1/R, позволяющий явно и теоретически корректно учитывать поляризацию. С его помощью проведено исследование влияния явного учета эффекта поляризации на качество рассчитываемых зарядов. Выборка молекул включала структуры с нейтральными и формально заряженными фрагментами, разделёнными мостиком различной длины. Для оценки вклада эффектов была использована ранее разработанная стратегия на основании разности в ошибке воспроизведения референсного молекулярного электростатического потенциала (МЭП), рассчитанного в приближении HF/6-31G\*, с помощью набора методов расчета зарядов. [1]

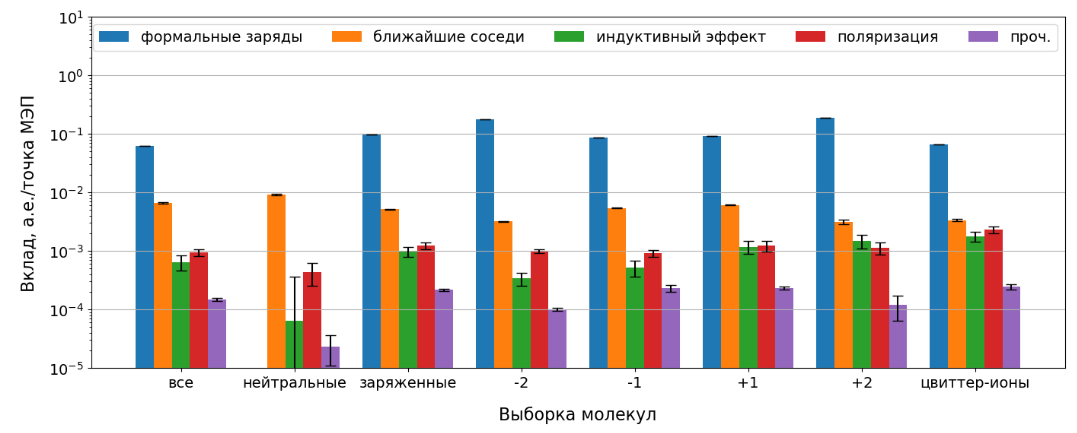


Рис. 1. Оценки вкладов эффектов для указанных выборок молекул.

Полученные результаты (рис. 1) показывают, что метод ДРЭО+1/R даёт заряды по качеству, сравнимые с зарядами RESP, получаемыми прямым подгоном под МЭП. Вклад эффекта поляризации в точность метода меньше, чем вклады формальных зарядов и ближайших соседей, и сопоставим по порядку со вкладом индуктивного эффекта. Влияние явно неучтенных эффектов в ряде случаев меньше влияния поляризации почти на порядок.

**Литература**

1. Shaimardanov A. R., Shulga D. A., and Palyulin V. A. Is an inductive effect explicit account required for atomic charges aimed at use within the force fields? // J. Phys. Chem. A. 2022. Vol. 126. Issue 36. P. 6278-6294.

2. Baker C. M. Polarizable force fields for molecular dynamics simulations of biomolecules. // Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci. 2015. Vol. 5. Issue 2. P. 241-254.