**Оценка значимости межмолекулярного переноса заряда для зарядовых моделей в контексте медицинской химии**

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

*Аспирант, 2 год обучения*

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

*E-mail: vitaly.frolov@qsar.chem.msu.ru*

Идея атомного заряда занимает важное место в химическом мышлении. Хотя атомный заряд не имеет однозначного определения, зарядовые модели нашли широкое применение в молекулярном моделировании (силовые поля, оценочные функции, модели QSAR/QSPR).

Требования к модели зависят от области применения. Для медицинской химии модель должна соблюдать баланс между хорошей точностью описания желаемого свойства и быстрым вычислением зарядов для множества молекул с большим числом атомов. Наиболее перспективными схемами расчета зарядов, удовлетворяющими данному требованию, являются модели на основе физики. Такие модели открывают возможность последовательной модификации через добавление явного описания все большего числа химических эффектов. Разработчики могут учесть сначала более базовые эффекты, а затем дорабатывать модель, включая в новые версии более специфические эффекты.

Ранее в нашей лаборатории была разработана зарядовая модель ДРЭО, которая, как было показано в [1], учитывает индуктивный эффект. Впоследствии, в качестве развития данного метода была предложена модель ДРЭО+ПОЛ [2], которая на базе ДРЭО, помимо индуктивного эффекта, учитывает также и эффект поляризации.

В случае поляризуемой зарядовой модели корректность описания поляризации может быть сопряжена с учетом другого эффекта - переноса заряда через пространство. На данный момент в модели ДРЭО+ПОЛ предполагается, что две разные молекулы влияют друг на друга только через электрическое поле — заряд на атоме одной молекулы вызывает перераспределение зарядов на другой молекуле, но при этом отсутствует прямой перенос заряда от одной молекулы к другой. Но существуют и иные поляризуемые модели на основе физики, которые допускают возможность такого межмолекулярного переноса. Чтобы выяснить, какое предположение ближе к реальности, требуется независимое от данных моделей исследование важности эффекта переноса заряда.

Цель данной работы — определить важность переноса заряда между молекулами (на примере молекул, образующих водородную связь) при помощи методов квантовой химии. Полученные в работе результаты позволят оценить адекватность и применимость поляризуемой зарядовой модели без явного учета межмолекулярного переноса заряда в контексте медицинской химии, а также наметить перспективы ее развития.

**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. Фролов В.С., Палюлин В.А., Шульга Д.А., Шаймарданов А.Р. Оценка значимости явного учёта эффекта поляризации в эмпирических методах расчёта зарядов // Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2023», секция «Химия». 10-21 апреля 2023 г.