**Дисперсионная поправка для метода молекулярной механики на основе DFT-D3**

***Андреенко И.В.1, Мезенцев И.А.2,3, Медведев М.Г.2***

*Студент, 1 курс бакалавриата*

*1Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ), Москва, Россия*

*2Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия*

*3Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, Москва, Россия*

*E-mail:* *ivandreenko@edu.hse.ru*

Геккон может ходить по гладкому стеклу благодаря щетинкам на его пальцах, которые связываются силами Ван-дер-Ваальса с поверхностью. Основной притягивающей составляющей Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий являются дисперсионные взаимодействия. Подобные слабые взаимодействия играют немаловажную роль в образовании структуры биологических систем. В методе молекулярной механики, который является одним из самых часто применяемых в медицинской химии методов, учёт этих взаимодействий крайне важен.

Целью этой работы является разработка потенциала отталкивания, позволяющего использовать дисперсионную поправку D3, популярную в DFT для учёта дисперсионных взаимодействий, в молекулярной механике вместо потенциала Леннарда – Джонса. Поскольку дисперсия – сила притяжения, то для её компенсации мы добавляем потенциал отталкивания.

|  |
| --- |
|  |
| $$E\_{1}=4ε⋅\left(\frac{σ}{R}\right)^{12}$$ | $$E\_{2}=ε⋅ⅇ^{-σR}$$ | $$E\_{3}=\frac{ε}{R}⋅ⅇ^{-σR^{2}}$$ |

Рис. 1. Сравнение потенциалов отталкивания на примере димера аргона

По ходу работы были написаны коды для расчета энергии диссоциации димера и для оптимизации параметров на основе минимизации ошибки рассчитанной энергии диссоциации. На примере кривой диссоциации димера аргона (Рис. 1.) был выбран потенциал отталкивания E3 предложенный в статье группы Ткаченко [1]. Далее были оптимизированы параметры для углерода и водорода. Увеличение количества типов атома углерода в зависимости от гибридизации и положения в цепи не привело к уменьшению средней ошибки на димер, поэтому такие действия не очень эффективны.

**Литература**

1. Khabibrakhmanov A., Fedorov D.V., Tkatchenko A. Universal Pairwise Interatomic van der Waals Potentials Based on Quantum Drude Oscillators // J. Chem. Theory Comput. American Chemical Society, 2023. Vol. 19, № 21. P. 7895–7907.