



Международная научная конференция
студентов, аспирантов и молодых учёных

ЛОМОНОСОВ – 2024

Секция «Химия»

12–26 апреля 2024

Материалы конференции



lomonosov2024.chem.msu.ru





Апробация эмпирической зарядовой модели с последовательным учетом индуктивного эффекта и поляризации на лекарствовподобных молекулах

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

Аспирант, 1 год обучения

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

E-mail: frol.vit99@gmail.com

Эмпирические методы расчёта зарядов являются быстрыми приближёнными способами воспроизведения зарядовой плотности молекул. Улучшение качества зарядов достигается за счет корректного учета различных физически осмысленных поправок (“электронных эффектов”). Ранее была выявлена естественная иерархия вкладов эффектов по важности [1]. В настоящее время ведутся исследования по явному учёту различных вкладов, в том числе поляризации [2]. При этом важно принимать во внимание корректность используемого описания и место эффекта в иерархии.

Ранее мы предложили метод ДРЭО+ПОЛ с последовательным учетом индуктивного эффекта и поляризации. В данной работе эта модель была апробирована на выборке лекарствовподобных молекул и сравнена с популярными зарядовыми моделями по качеству воспроизведения молекулярного электростатического потенциала (МЭП). Были изучены случаи, в которых одновременный учет поляризации и индуктивного эффекта дает значительное улучшение описания МЭП по сравнению с учетом одного лишь индуктивного эффекта.

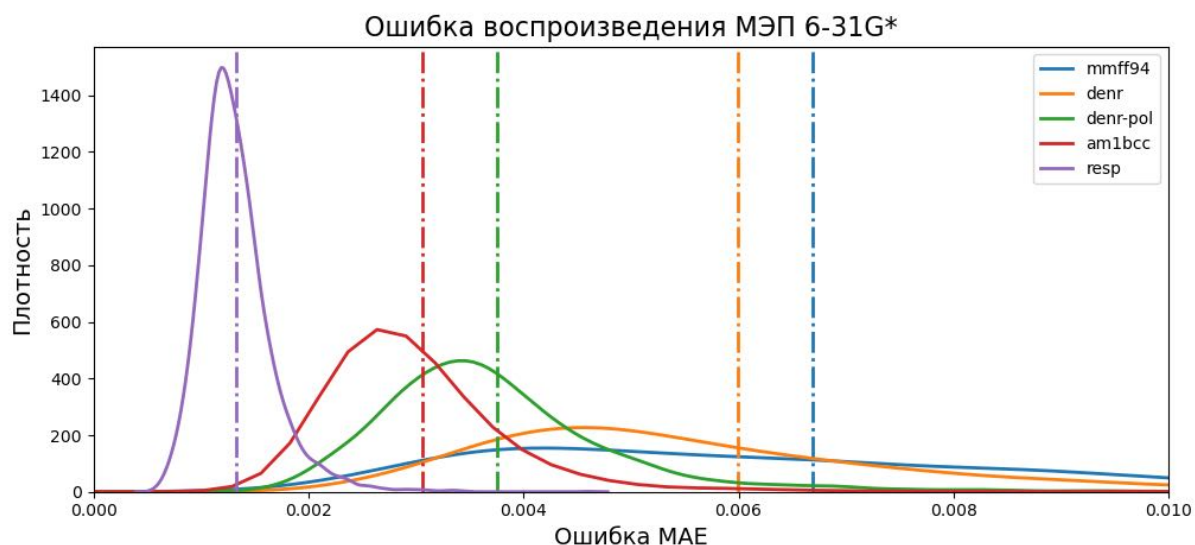


Рис. 1. Сравнение ДРЭО+ПОЛ с другими методами по качеству воспроизведению МЭП.

Полученные результаты показывают, что ДРЭО+ПОЛ даёт заряды близкие по качеству к полуэмпирическим методам (рис. 1), но требует меньших вычислительных затрат. Поскольку выборка молекул включала лекарствовподобные молекулы, ДРЭО+ПОЛ имеет перспективы применения для моделирования лиганд-рецепторных взаимодействий, для которых баланс между качеством и скоростью вычисления является важным ввиду большого размера соответствующих молекулярных систем.

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.

