**Molecular Electrostatic Potential (MESP) 분석**

2025.04.02 안용상

<https://wires.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/wcms.1601>

**MESP란?**

MESP(Molecular Electrostatic Potential, 분자 정전기 퍼텐셜)은 분자 내 전자 분포와 핵의 위치를 바탕으로, 분자의 주어진 지점에서 전하(양성자)가 느끼는 정전기적 퍼텐셜을 의미한다. 이는 양자화학 계산을 통해 유도되며, 분자의 반응성, 상호작용 가능성 등을 직관적으로 시각화하고 해석하는 데 매우 유용한 도구이다.