
CHAP 4: MECANIQUE MOLECULAIRE

Représentation empirique de l'énergie moléculaire

IV-1. Généralités sur la MM

- En mécanique moléculaire on considère une molécule comme un ensemble d'atomes reliés par les liaisons (liaisons chimique) et on calcule l'énergie d'interaction entre ces atomes en faisant la somme d'une série de fonctions de potentiel.
- Cette technique calcule l'énergie des atomes (et non plus des électrons)
- L'énergie stérique minimale calculée est la somme des contributions apportées par les énergies d'élongation, de flexion, de torsion, de Van der Waals, électrostatique,....

$$E(\text{stérique}) = E(\text{totale}) = E(L) + E(\varphi) + E(\Theta) + E(\text{VdW}) + E(e) + E(H)$$

- La mécanique moléculaire utilise les approximations suivantes:
 - Chaque atome constitue une particule;
 - Un atome est considéré comme une sphère rigide ayant un rayon et une charge déterminée;
 - Les énergies sont calculées par des formules dérivées de la mécanique classique.

IV.2. champs de force en mécanique moléculaire :

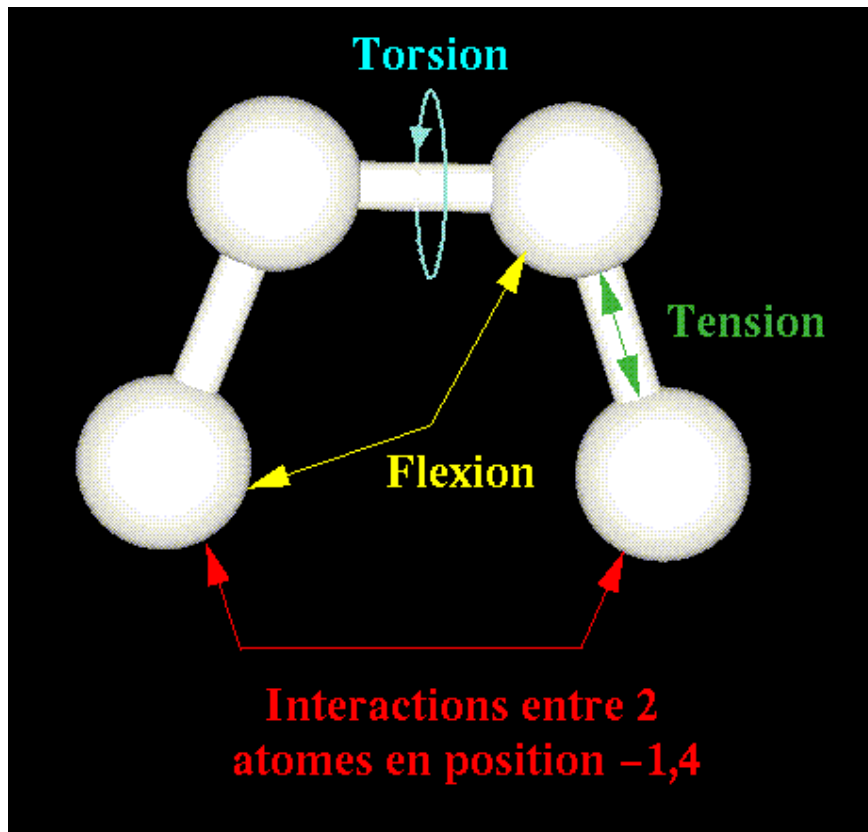
On appelle **champ de force** le modèle mathématique représentant **l'énergie potentielle** d'une molécule en mécanique moléculaire.

- Il est important de noter que les champs de forces constituent une approche purement **empirique**.
- Il désigne à la fois l'équation mathématique (fonction d'énergie potentielle) et les paramètres qui la composent

.

IV-3. Energie stérique totale : Est

$$E = E_{stretching} + E_{bending} + E_{torsion} + E_{VdW} + E_{elec} + E_{hydrogen}$$



E stretching(d'élongation des liaisons)
+ **E bending**(déformation des angles ou flexion)
+ **E torsion**(déformation des angles dièdres)

Énergie de liaison

Le terme « Stretching » représente l'élongation des liaisons.

Le terme « Bending » représente la variation des angles.

Le terme « Torsion » se rapporte à l'énergie de torsion des angles dièdres.

Le terme « VdW » rend compte des énergies d'interaction non covalente entre atome non liés.

Le terme « Elec » rend compte des énergies d'interaction électrostatiques entre atomes non liés.

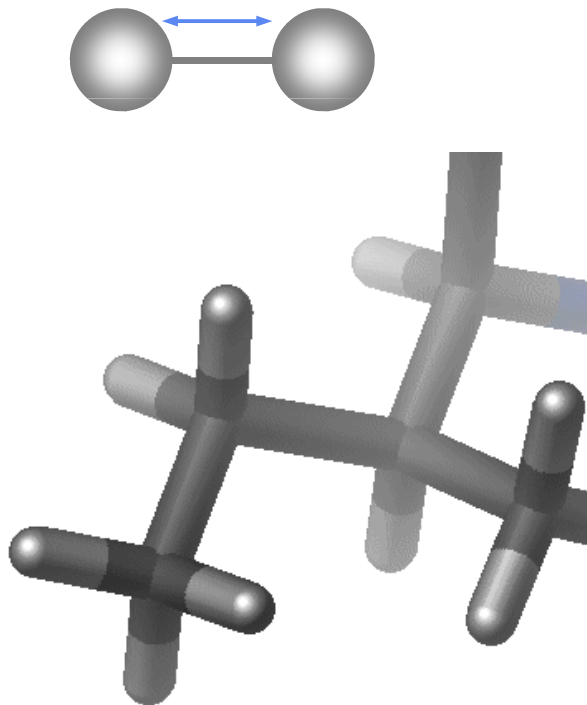
Le terme « Hydrogen » rend compte des liaisons d'hydrogènes.

1. Energies d'interactions entre atomes liés

a. Energie d'élongation

Energie d'élongation « Stretching » : Les liaisons entre deux atomes

Elongation des liaisons



$$E_{bond} = \sum_{\text{liaisons}} k_b (b - b_0)^2$$

Exemple des valeurs expérimentales:

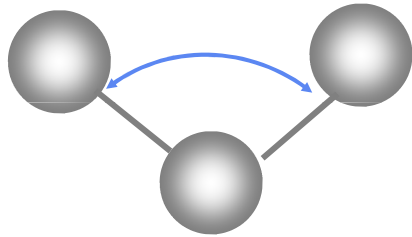
Tableau I: valeurs expérimentales de b_0 et K_b .

Liaison	$b_0(\text{Å})$	$K_b(\text{kcal/mol. Å}^2)$
$\text{Csp}^3 - \text{Csp}^3$	1.523	317
$\text{Csp}^2 - \text{Csp}^2$	1.497	317
$\text{Csp}^2 = \text{O}$	1.208	690

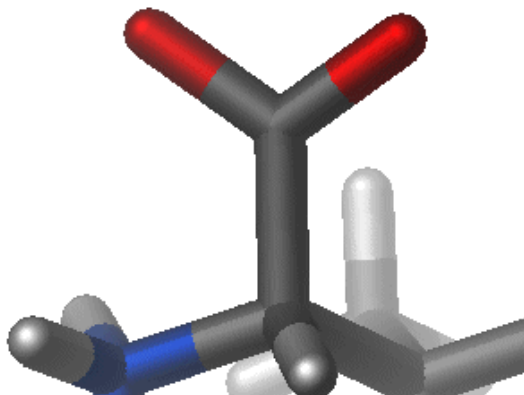
b. Energie de flexion.

Le terme « Bending ou angle » représente la variation des angles.

Distorsion des angles de valence



$$E_{angle} = \sum_{\substack{\text{angles} \\ \text{valence}}} k_{\theta} (\theta - \theta_0)^2$$



Exemple des valeurs expérimentales:

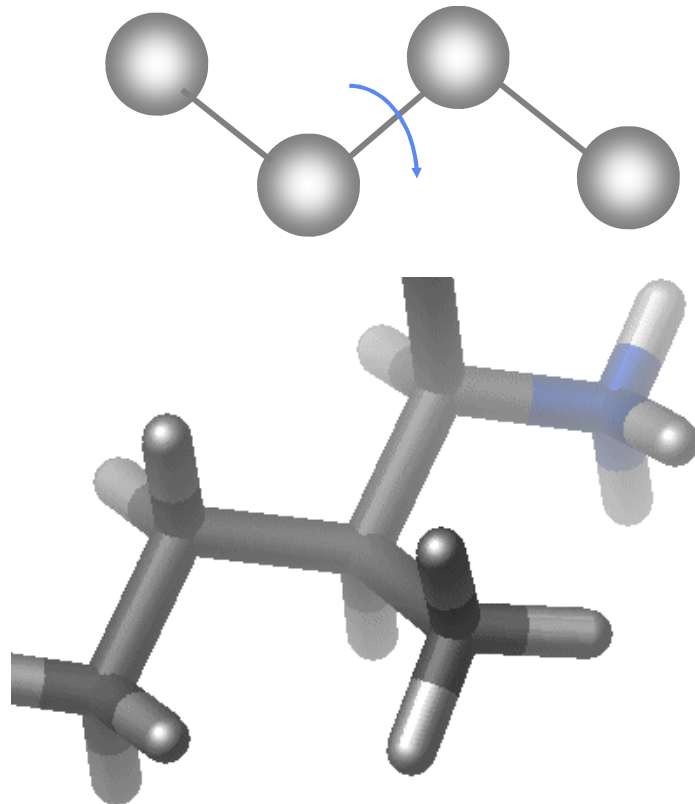
Tableau I: valeurs expérimentales de θ_0 et K_θ .

Liaison	θ_0	K_θ (kcal/mol. Å ²)
Csp ³ -Csp ³ -Csp ³	109.47	0.0099
Csp ³ -Csp ³ -H	109.49	0.0079
Csp ³ -Csp ² -Csp ³	117.2	0.0121

c. Energie de torsion

Elle concerne l'angle dièdre formé par les atomes 1-2-3-4.

Distorsion des angles de dièdre



$$E_{\text{torsion}} = \sum_{\text{angle torsion}} k_{\varphi} \left[1 + \cos(n\varphi - \delta) \right]$$

2. Energies d'interactions entre atomes non liés

a. Energie électrostatique

La molécule est décrite par des charges ponctuelles q_i centrées sur les atomes.

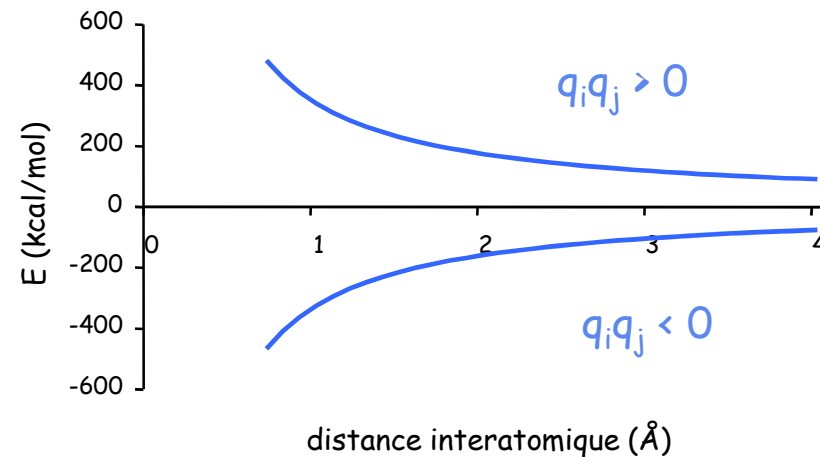


$$E_{\text{élec}} = \sum_{i,j} \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \quad \text{Loi de Coulomb}$$

ϵ_0 = permittivité du vide ($\epsilon_0 = 1$)

ϵ_r = permittivité relative

R_{ij} : rayon entre atomes



a. Energie électrostatique: suite

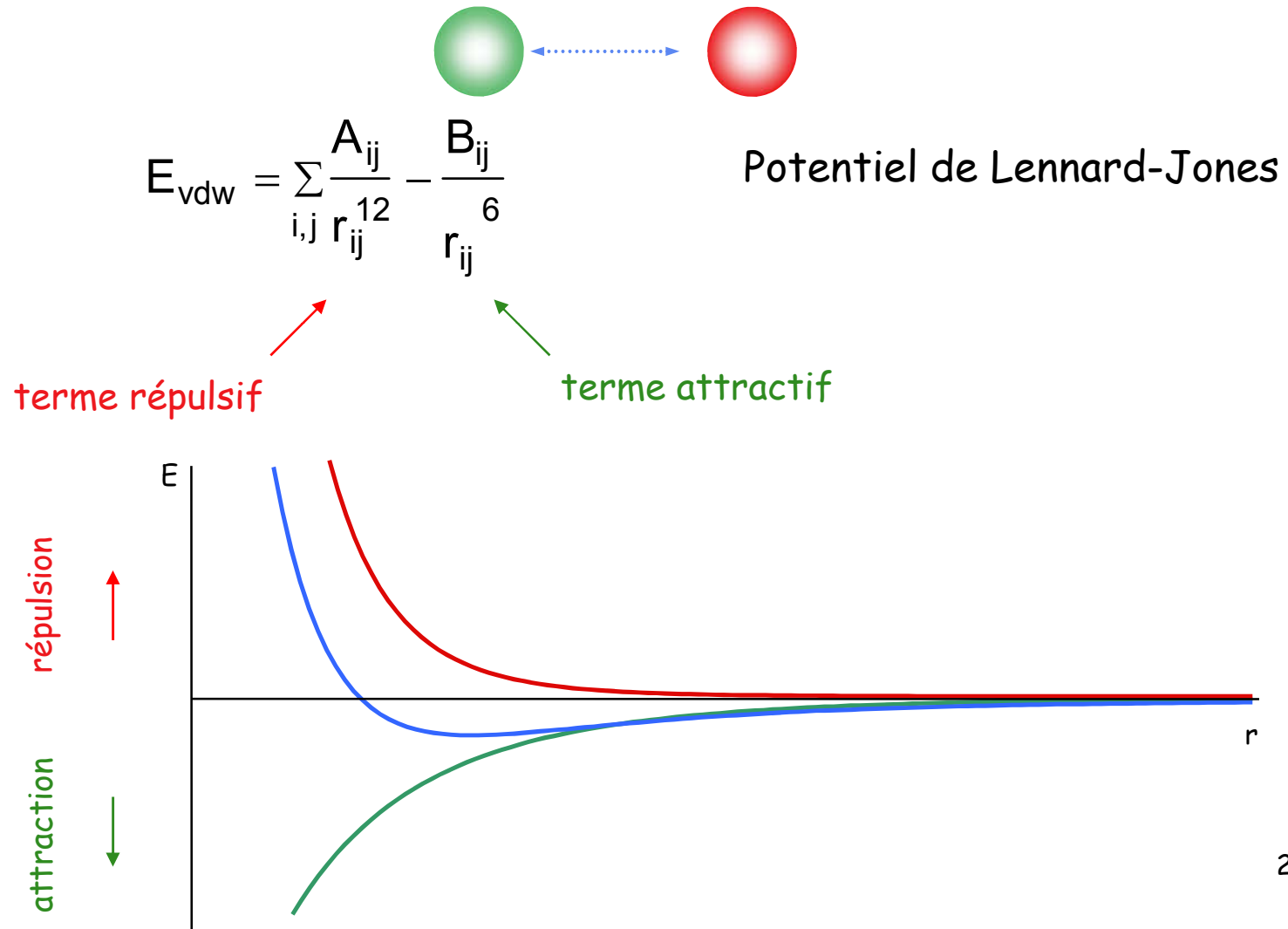
Calcul des charges q_i et q_j

À partir de méthodes ab initio, empirique ou semi-empiriques:

exemples des méthodes

- **Del Ré:**
calcul des charges sur les liaisons de type s (sigma)
- **Gasteiger-Marsili:**
calcul des charges sur les liaisons de type s (sigma) et p (pi)
fait appel à la notion d'électronégativité
- **Hückel:**
calcul des charges sur les liaisons de type p
fait appel à la notion d'électronégativité

b. Energie d'interactions de van der Waals



IV-4. Exemples de champ de forces

Champ de forces = ensemble de fonctions d'énergie potentielle

+ paramètres numériques (constantes de forces, valeurs d'équilibre, etc.)

obtenus expérimentalement ou évalués théoriquement

Différents champs de force en mécanique moléculaire :

- **MM2/MM3/MM4** :

MM2 est le premier champ de force développé par Allinger et col. Il a été conçu au début pour les molécules simples (alcane, alcène, alcyne non conjugués, amines...), mais ses versions améliorées MM3 (1989) et MM4 (1996) lui permet de traiter des molécules organiques de plus en plus complexes.

- **CHARM(Bio+)** :

Développé par Karplus et col, pour le calcul de biomolécules. Son concept est semblable à celui d'AMBER. Bien que au début, ce champ de force est conçu pour les aminoacides et les protéines, maintenant il traite d'autres biomolécules.

AMBER :

AMBER (Assisted Model Building with Energy Refinement), a été écrit par Kollman [54].

Le champ est paramétré pour les protéines et les acides nucléiques (UCSF, 1994). Il a été

utilisé pour les polymères et pour d'autres petites molécules.

Merci pour votre assistance

