

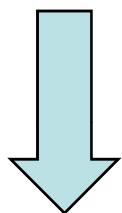
# INTRODUCTION GÉNÉRALE

---

## Computational Chemistry

Chimie computationnelle

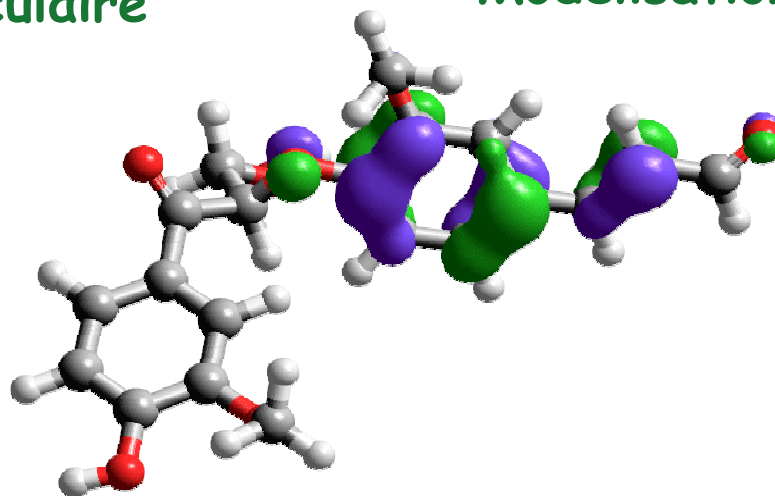
Chimie informatique



**Molecular modeling**  
Modélisation moléculaire

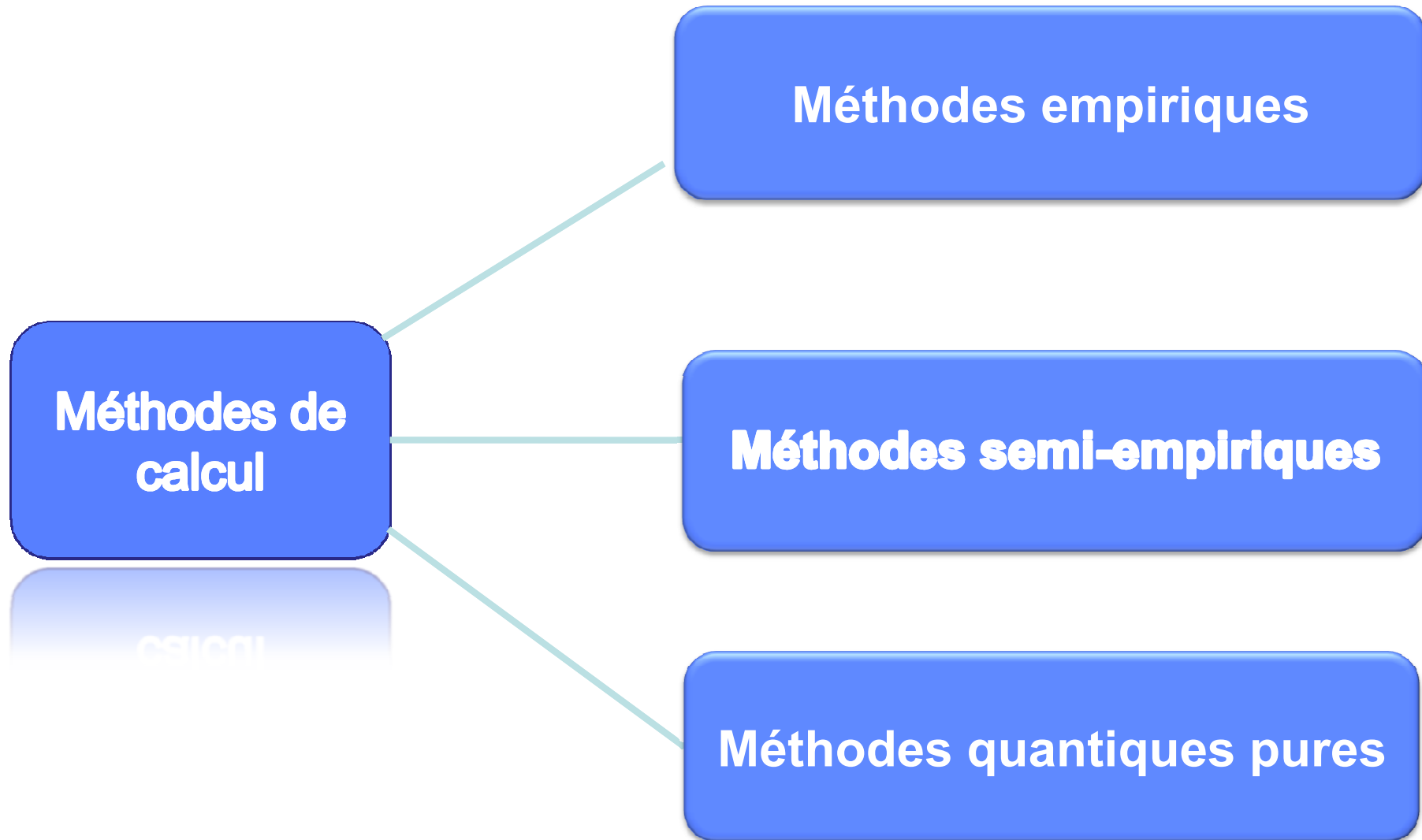


**Process Modeling**  
Modélisation des Procédés



# CHAP 3 : Méthodes de Calcul

---



# Méthodes de calcul

---

## 1. Méthodes quantiques pures (*ab initio*, DFT)

**Molécules concernées** : petites molécules ou fragments moléculaires

**Nb d'atomes** : ~ 10

**Objectif** : déterminer l'énergie et la distribution électronique

-> Énergies moléculaires calculées avec l'équation de Schrödinger  $H\Psi = E\Psi$  avec le formalisme des orbitales moléculaires.

**Principe** :

- on ne traite **que des électrons** : les noyaux sont considérés comme fixes (approximation de **Born-Oppenheimer**)

-résolution de l'équation de Schrödinger **avec un minimum d'approximations, et on traite que le système électronique dans l'équation de Schrödinger.**

-On utilise plusieurs corrélations et plusieurs bases quantiques:

-Ex: **ab initio/Correlation: HF, MP2, MP3, ...**

-**DFT (La théorie de la fonctionnelle de la densité)/functionals: B3LYP; LDA; GGA; ZORA**

-Ex de bases quantiques; **STO-3G, 6-31G++ , 6-311G \*\* (d,p)**

## 2. Méthodes quantiques semi-empiriques

**Molécules concernées :** molécules de taille moyenne

**Nb d'atomes :** ~ 100

**Objectif :** déterminer l'énergie et la distribution électronique

**Principe :**

- idem méthodes *ab initio* ou DFT

- Une seule base quantique: STO-3G

mais on considère que les électrons de valence

-résolution de l'équation de Schrödinger avec plusieurs approximations

-Les méthodes les plus utilisés sont:

Méthode AM1

Méthode PM3

Méthode CNDO/2

Méthode INDO

Méthode NDDO

Méthode MINDO/3

Méthode MNDO

## 3. Méthodes empiriques

**Molécules concernées** : molécules de grande taille

**Type de molécules** : Hydrocarbures, Polymères, Protéines, Acides nucléiques, Membranes, Polysaccharides, antibiotiques....

**Nb d'atomes** : > 100 et < 10 000

**Objectif** : déterminer les minimas de l'énergie globale d'interaction  
(Energie stérique totale)

**Principe** :

- Ces méthodes basées sur la mécanique classique.
- On considère que la Molécule = billes + ressorts (forces harmoniques) associés à une série de fonctions de potentiel :

$$E_{tot} = E_{p1} + E_{p2} + E_{p3} + \dots$$

La somme de ces fonctions est exprimée sous la forme d'un champ de forces moléculaire ("force field")

Ex de champs de forces. MM2; MM3; AMBER; BIO+; MM+

- Les principales méthodes: Mécanique moléculaire et dynamique moléculaire
- Méthodes QSAR, QSPR, Drug-Likeness, Molecular Docking,.....

---

Merci pour votre assistance

