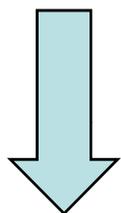


INTRODUCTION GÉNÉRALE

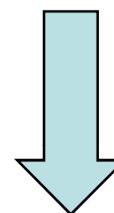
Computational Chemistry

Chimie computationnelle

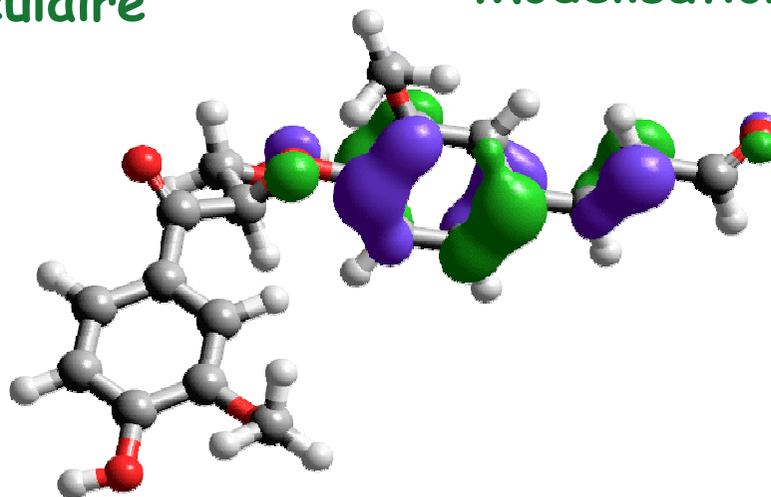
Chimie informatique



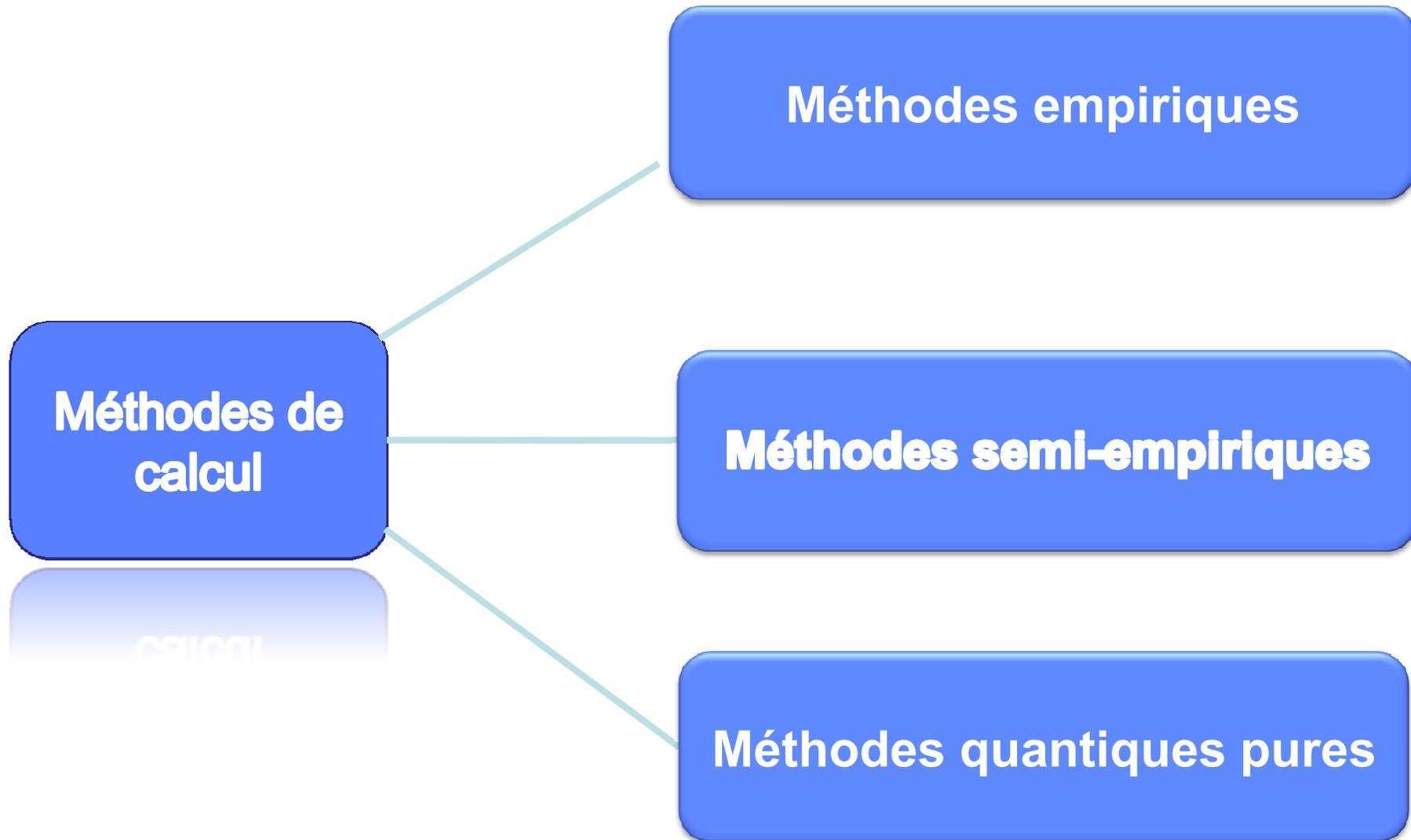
Molecular modeling
Modélisation moléculaire



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

