

Examen de janvier 2009

Durée 1H30

Sans documents.

1- Questions de cours. Ordres de grandeur. *A présenter sous forme de Tableau.*

Donner l'ordre de grandeur en faisant, si nécessaire, un *petit* dessin explicatif

a) *Des distances* (en Å): C-C ; C=C ; C≡C ; O-H ; C-H ; distance "de van der Waals" H...H.

b) *Des énergies* (en kcal/mol): de liaison C-C ; de liaison hydrogène OH...O=C ; de vaporisation de l'eau ; de la barrière d'inversion de NH₃ ; de la barrière de rotation de l'éthane ; de l'attraction maximale entre 2 atomes Ar...Ar ; d'interaction Na⁺ ... Cl⁻ à 10 Å.

c) *De temps* (en s) : d'une vibration O-H ; d'inversion de NH₃ ; de relaxation de l'eau ; de dénaturation d'une protéine à 300 K.

2- **Dynamique:** Expliquer brièvement les différences entre les mouvements atomiques générés par la dynamique moléculaire classique et par le calcul des modes normaux de vibration.

3- **Charges atomiques.**

a) Expliquer la définition du potentiel électrostatique $\phi(M)$ en un point M autour d'une molécule H₂O, et comment on peut en "dédire" des charges atomiques.

b) Est-ce cette méthode qui est utilisée pour obtenir les charges de l'eau dans les modèles SPC ou TIP3P ?

c) Proposez un test pour la qualité des charges atomiques de l'eau liquide.

d) Proposez un test pour la qualité des paramètres "de van der Waals" de l'eau liquide.

4- La structure de la protéine "PTI" dépend du temps et de l'environnement. Commenter brièvement.

5- *Echantillonnage conformationnel* d'une molécule, par exemple d'éther -couronne 18C6 en phase gazeuse. Proposer 3 critères pour vérifier que l'on a bien échantillonné sa structure.

6- Simulation de dynamique moléculaire d'une molécule A, à partir de sa structure RX, obtenue avec une résolution de 3 Å.

a) Qu'est ce que cela veut dire ? Avec quelle "précision" a-t-on les distances entre atomes ?

b) Proposer un protocole pour démarrer la simulation.

7- Simulation par dynamique moléculaire du Cryptate 222/K⁺ dans l'eau.

- a) On simule le Cryptate 222/K⁺ dans une boîte d'eau en appliquant les "conditions périodiques" aux limites. De quoi s'agit-il ?
- b) La durée simulée est de 1 ns. Combien de pas de calcul sont effectués ?
- c) On étudie les fonctions de distribution radiale $g(K...O)$ entre l'atome K et l'oxygène O_{H2O}. Tracer schématiquement $g(K...O)$, en précisant les caractéristiques.
Comment en déduire le nombre d'hydratation de K⁺ ?

Données Numériques

$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$

$1 \text{ eV} = 96,472 \text{ KJ mol}^{-1}$

Nombre d'Avogadro

$N = 6,0221367 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

RAPPELS: Interaction de Coulomb : $E \text{ (kcal/mol)} = 332 \frac{q \ q'}{R}$ (avec q en e⁻ et R en Å)
Interaction de Lennard-Jones: $E = \epsilon (R^*/R)^{12} - 2 \epsilon (R^*/R)^6$