

La modélisation moléculaire

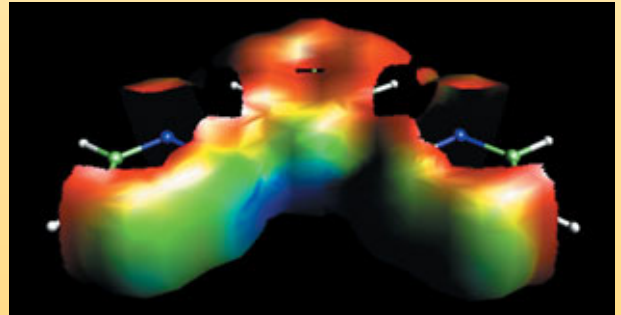
Les chercheurs en chimie et en biologie, ainsi qu'en physique des matériaux, font de plus en plus largement appel à des outils qui leur permettent de prévoir avec toujours plus de finesse les effets des molécules en fonction de leur structure et, ce qui est encore plus intéressant pour les concepteurs, d'imaginer la structure de nouveaux édifices qui est susceptible d'induire un comportement donné et *in fine* produire l'effet recherché.

Cette approche **théorique** dispose d'une large gamme d'outils mais parmi les principaux figurent la chimie quantique, la mécanique et la dynamique moléculaires, également utilisées en physique des matériaux.

La **chimie quantique**, basée sur les lois de la mécanique quantique, sert avant tout à décrire la structure des molécules et leur comportement dans les processus tels que les réactions chimiques.

La **dynamique moléculaire classique** simule le mouvement des atomes des systèmes moléculaires et l'évolution de leur configuration spatiale à partir d'équations de la mécanique classique. Elle donne accès à des propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques.

Comme la chimie quantique, la **mécanique moléculaire** est une méthode permettant d'étudier la structure et le comportement des molécules mais elle est moins coûteuse, plus rapide et, donc, peut être utilisée pour décrire les systèmes de milliers d'atomes tels que les **macromolécules biologiques**.



CEA/DEN/J.-P. Dognon

Représentation, calculée par une méthode de chimie quantique, du potentiel électrostatique autour d'une molécule de BTP (bis-triazinyl-pyridine) développée pour le procédé Sanex de séparation des actinides et des lanthanides.