**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**

**MINISTERE DE L’ENSEIGNEMENT SUPERIEUR**

**ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**Université de Jijel**

**2éme Année Master**

**TP N°02**

**Equilibre chaise – bateau-bateau croisé en fonction**

**Du minimiseur utilisé**

Il s’agit de comparer les différences énergétiques entre les déférents conformère du cyclohexane. Ensuite construire la forme bateau et minimiser pour estimer l’énergie de l’état de transition de cette inter-conversion en fonction du minimiseur (PRCG) par mécanique moléculaire et avec un champ de force (Amber).

1 2 3

 Pour le cyclohexane non substitué on suit les étapes de calculs suivant au cours de notre TP.

***1-Calcul d’énergies de la forme chaise.***

1. Encore une fois, on va activer Start log **(File)** pour avoir « listing » des résultats.
2. Ensuite, on choisit le champ de force AMBER via Molecular Mechanics **(Setup)** Options **:** Dist. Dep. A 1(1/r2). Electro. Et van der waals à 0.5. Cutoffs à “none”, **OK.**
3. Choisir Select Parametrs Set **(Setup)** activer amber2.

Pour construire le cyclohexane assurez-vous que le Defautelement est C, niveau Atoms et Labels **(Display)** à number, et Explieit H à off **(Build).**

1. Tracer un cycle à 6 à l’écran. Add H & Model Build **(Build)**. C’est fait mais la molécule n’est pas optimisée.

 On peut ici mesurer des distances (1,54 A°) des angles (109,5°), des torsions (60°).Il faut que Atoms et Multiple Selection **(Select)**; soit ″On″.

NB : On utilise le 2émme icône et on lit les valeurs en bas de l’écran.

  On clique ensuite la souri-D-à l’écran pour désactiver la sélection.

 On peut faire un premier calcul simple via Single point **(Compute)**, ce qui donne une énergie initiale de 1,64 Kcl/mol et un RMS de 3,02. Ce n’est pas un minimum local ou bien une optimisation finale on peut ajouter ce commentaire dans le ficher.log via log comments **(File)**.

1. Optimisé la structure choisissant Geometry Optimization  **(Compute)** puis PRCG comme algorithme. RMS de 0,1 **OK**, Après le calcule on obtient maintenant l’énergie de la molécule de la forme chaise du cyclohexane est vous étés juste si vous trouver une valeur de 1,33 Kcal/mol et un gradient de 0,07.
2. Noter les nouvelles valeurs dans l’évaluation des distances (1,53A°), des angles (110,2°), des torsions (58,0°) après minimisation.

***2- Calcul d’énergies de la forme bateau.***

 Pour construire le bateau il faut définir un plan de réflexion, continuer les étapes suivant :

1. Avec Show H **(Display)** à ″off″, le mode Multiple Selection à ″on″, et avec l’outil Sélection (2émme icône) on sélectionne C-1-2 et C-4-5. Les deux liens deviennent actifs en vert.
2. On choisit ensuite Name Selection **(Select)** et on active Plane, **OK**.

NB : On doit avoir Show H actifs.

1. On sélection ensuite avec la souri –G-D- (deux doigts) la zone C 2,3,4 avec les hydrogènes (ce qui trace un rectangle) et enfin Reflect **(Edit)**.
2. On minimise la forme bateau de la même façon que la chaise, on obtiendra une énergie de 8,31 Kcal/mol avec un gradient de 0,08.
3. ***Calcul d’énergies de la forme bateau-croisé.***

 Une troisième forme qui donnerait un vrai minimum local serait le bateau croisé pour le construire:

1. On désactive avec souris-D sur l’écran, on désactive Show H, on sélectionne 4 carbones et un angle de torsion via les liens 6-1, 1-2 et 2-3, dans cet ordre.
2. On choisit Constrain Bond Torsion **(Build)** puis Other et on écrit 30, **OK**.

NB : On désactive la torsion avec souris-D à l’écran mais la contrainte reste activée.

1. On reconstruit la molécule avec Model Build ou en cliquant deux fois sur l’outil Sélection (2émmé icônes).
2. On optimise encore de la même façon et on devrait obtenir un énergie de 7,22 Kcal/mol avec un gradient de 0,07. Ce qui donne un E (bateau-chaise) de 6,98 Kcal/mol et un E (croisé-chaise) de 5,89 Kcal/mol, en accord avec l’expérience.

***Questions***

* Faire le bilan but, introduction, notion théorique sur l’équilibre réactionnelle mis en jeu.
* Tracer manuellement le diagramme énergétique des résultats :
* Chaise : minimum global
* Bateau : minimum local
* Bateau-Croisé : minimum local

 Forme

 3

 2

 1

 E Kcal/mol

* Rajoutez des commentaires sur les déférents E obtenu.
* Que vous devez Conclure.

.

.