
Développement d'outils pour la spectroscopie infrarouge par dynamique moléculaire polarisable

Florian Thauhay^{*1}, Gilles Ohanessian¹, and Carine Clavaguera¹

¹Laboratoire de Chimie Moléculaire (LCM) – Ecole Polytechnique de Palaiseau, CNRS : UMR9168 – France

Résumé

Des spectres infrarouge de biomolécules ont été obtenus par des simulations de dynamique moléculaire à température finie, en utilisant le champ de forces polarisable AMOEBA [1,2]. Grâce à un traitement de haut niveau des interactions électrostatiques et à la prise en compte explicite des effets de polarisation, le champ de forces offre une sensibilité importante aux effets d'environnement, comme les liaisons hydrogène ou les molécules d'eau. Cette approche permet de reproduire une grande variété de modes, tels que les élongations N-H ou O-H, ou encore les bandes amides I et II des peptides.

Nous présentons ici plusieurs exemples, comme le N-méthylacétamide, des ions solvatés ou des peptides. Dans chaque cas, les spectres calculés sont comparés aux spectres expérimentaux. Dans le but d'améliorer la représentation des déplacements de bandes observés en phase condensée, une optimisation de certains paramètres du potentiel a été réalisée.

Des outils ont été développés pour permettre l'identification et la visualisation des principaux modes de vibration. Ils reposent sur le couplage entre deux méthodes implémentées dans la suite Tinker. Les spectres réalisés via la méthode DACF (dipole autocorrelation function) fournissent les fréquences des modes d'intérêt. La méthode DMD (Driven molecular dynamics) [3] permet ensuite d'effectuer de courtes simulations en incorporant une force additionnelle, sinusoïdale de pulsation choisie, avec pour finalité de faire résonner un mode précis. On obtient, entre autres, un suivi de l'énergie absorbée par chaque coordonnée interne, et les modes résonnants sous la forme de déplacements cartésiens.

1. P. Ren and J. W. Ponder, *J. Phys. Chem. B*, 2003, 107, 5933
2. J. W. Ponder and al., *J. Phys. Chem. B*, 2010, 114, 2549
3. J. M. Bowman, X. Zhang and A. Brown, *J. Phys. Chem.*, 2003, 119, 646

Mots-Clés: dynamique moléculaire – spectroscopie infrarouge – modes normaux – champ de forces polarisable

^{*}Intervenant