

*De nombreux champs de forces empiriques spécifiques des biomolécules sont de nos jours disponibles. Les applications de l'utilisation de tels champs de forces impliquent des études structurales et dynamiques de systèmes macromoléculaires et permettent d'expliquer de nombreux phénomènes biologiques. Cependant, la validité des résultats obtenus lors de ces études est directement dépendante de la disponibilité du champ de forces utilisé et de sa spécificité vis-à-vis de la structure étudiée. Dans ce contexte un nouvel outil informatique, nommé PyRED, dédié à la génération de champs de forces additifs de type Amber et Glycam a été développé. PyRED est capable de générer des bibliothèques et paramètres de champ de forces pour de nouvelles molécules et potentiellement tout type de fragments moléculaires. Tous les éléments du tableau périodique sont gérés. Une attention toute particulière a été portée sur la génération de champ de forces pour biomolécules et complexes bioinorganiques. Des algorithmes robustes ont été développés permettant entre autres la définition rigoureuse de l'équivalence chimique, de types et noms d'atomes, d'atomes fantômes et d'atomes de carbone unifiés. Le serveur Internet R.E.D. Server Development a aussi été créé. Ce serveur interface le programme PyRED, et fournit à la communauté scientifique le matériel et les logiciels nécessaires pour la production de nouveaux champs de forces. Dans une approche applicative, des champs de forces pour un biopolymère acide nucléique peptidique, une structure supramoléculaire avec des complexes de platine(II) et des fullerènes C<sub>60</sub> fonctionnalisés et un complexe bioinorganique avec un dimère d'hème ont été créés puis validés. Les structures des molécules correspondantes ont été étudiées par dynamique moléculaire en phase condensée.*

*Mots clés : Biomolécules - Champ de forces additif - Complexe bioinorganique - Dynamique moléculaire - Métal de transition.*

*Nowadays numerous empirical force fields, which are specific to biomolecules are available. Applications of the use of these forces fields involve structural and dynamical studies of macromolecular systems, and allows the description of many biological phenomena. However the validity of the results obtained in these studies is directly dependent on the availability of the force field, and on its specificity towards the studied molecule. In this context a new program, named PyRED, which is dedicated to the generation of additive Amber and Glycam force fields has been developed. PyRED is able to generate force field libraries and parameters for new molecules, and potentially for any type of molecular fragments. All the elements of the periodic table are handled. A particular attention has been given to the generation of force fields for biomolecules and bioinorganic complexes. Robust algorithms have been developed allowing among others the rigorous definition of chemical equivalencing, of atom types and atom names, extra-points and unified carbons. The Internet server R.E.D. Server Development has also been created. This server interfaces the PyRED program, and provides to the scientific community the hardware and software required for the production of new force fields. In an applicative approach force fields for a peptide nucleic acid biopolymer, a supramolecular structure with platinum(II) complexes and functionalized C<sub>60</sub> fullerenes and a bioinorganic complexes composed of a heme dimer have been created and validated. The structures of the corresponding molecules have been studied by molecular dynamics in condensed phase.*

*Keywords : Biomolecules - Additive force field - Bioinorganic complex - Molecular dynamics - Transition metal.*