

---

# Interactions intermoléculaires : de l'analyse topologique aux champs de forces polarisables

Christophe Narth<sup>\*1</sup>, Louis Lagardère<sup>2</sup>, Julia Contreras-García<sup>3</sup>, Pengyu Ren<sup>4</sup>, and Jean-Philip Piquemal<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de chimie théorique (LCT) – CNRS : UMR7616, Université Pierre et Marie Curie (UPMC) - Paris VI – 4 place Jussieu, CC-137, F-75252 Paris, France

<sup>2</sup>Institut de calcul et de la simulation (ICS) – Université Pierre et Marie Curie (UPMC) - Paris VI – Tour 12-13, 4ème étage, 4 place Jussieu, F-75005 PARIS, France

<sup>3</sup>Laboratoire de Chimie Théorique (LCT) – CNRS : UMR7616 – 4 place Jussieu, CC-137, F-75252 Paris, France

<sup>4</sup>Department of Biomedical engineering – University of Texas at Austin, Austin, Texas 78712-1062, États-Unis

## Résumé

L'analyse topologique quantique nous offre une meilleure compréhension des interactions moléculaires, notamment par le biais de l'étude du gradient réduit de la densité électronique (NCIplot) et de la fonction de localisation électronique (ELF/TopMod), et nous permettent d'identifier les mécanismes importants mis en jeu. Seulement, ces méthodes ne peuvent s'appliquer à des systèmes de grandes tailles, d'intérêt biologique en particulier. Cette limite s'applique donc aussi à la théorie de la fonctionnelle de la densité. Les méthodes empiriques, telles que les champs de forces franchissent cette barrière mais les interactions intermoléculaires, souvent prépondérantes au sein des systèmes biologiques, nécessite un meilleur traitement afin de mimer les effets électroniques et quantiques au sens large. Les champs de forces de nouvelle génération, dit polarisable, ont cette ambition. Nous présenterons ici les avancées de l'implémentation ainsi que la méthodologie de SIBFA (Sum of Interactions Between Fragments Ab-initio computed) et enfin les apports significatifs de notre méthode.

**Mots-Clés:** champs de forces, ELF, NCIplot, dynamique moléculaire

---

\*Intervenant