

Supplementary material

	QM/CHARMM	QM/AMBER	QM/AMBER:ERS	%FF	%ERS
1 Ru	0.901010	0.900434	0.903170	0.06	0.90
2 N	-0.267782	-0.265261	-0.266307	0.95	0.27
3 N	-0.260042	-0.257370	-0.257770	1.04	0.26
4 C	-0.211774	-0.207025	-0.206294	2.29	0.21
5 C	-0.221703	-0.220072	-0.216547	0.74	0.22
6 C	-0.164638	-0.155021	-0.165156	6.20	0.17
7 C	-0.170400	-0.164198	-0.171166	3.78	0.17
8 C	-0.315804	-0.335806	-0.339007	5.96	0.34
9 C	-0.310847	-0.327406	-0.331960	5.06	0.33
10 C	0.554564	0.546930	0.551794	1.40	0.55
11 C	0.550356	0.556053	0.557940	1.02	0.56
12 C	-0.070337	-0.075786	-0.071103	7.19	0.07
13 C	-0.111679	-0.118609	-0.112591	5.84	0.11
14 C	-0.204949	-0.229498	-0.225559	10.70	0.23
15 C	-0.227322	-0.244690	-0.237578	7.10	0.24
16 N	0.044752	0.029868	0.023484	49.83	0.02
17 N	0.043425	0.030250	0.023305	43.55	0.02
18 C	0.054526	0.064431	0.063817	15.37	0.06
19 C	0.088251	0.100942	0.090435	12.57	0.09
20 C	-0.302646	-0.293671	-0.305498	3.06	0.31
21 C	-0.293878	-0.301018	-0.311110	2.37	0.31
22 C	-0.165194	-0.152411	-0.168246	8.39	0.17
23 C	-0.264649	-0.219637	-0.217689	20.49	0.22
24 H	0.249390	0.253770	0.254259	1.73	0.25
25 H	0.206015	0.211728	0.225514	2.70	0.23
26 H	0.291790	0.274331	0.272989	6.36	0.27
27 H	0.282051	0.266721	0.267841	5.75	0.27
28 H	0.315422	0.307170	0.308282	2.69	0.31
29 H	0.340666	0.322992	0.318881	5.47	0.32
30 H	0.238365	0.242918	0.250829	1.87	0.25
31 H	0.227734	0.224224	0.238147	1.57	0.24
32 H	0.240017	0.245875	0.254187	2.38	0.25
33 H	0.262161	0.269424	0.273638	2.70	0.27
34 N	-0.285198	-0.285957	-0.284898	0.27	0.28
35 H	0.237555	0.241299	0.250983	1.55	0.25
36 C	-0.210808	-0.209953	-0.207775	0.41	0.21
37 C	-0.222226	-0.224263	-0.214512	0.91	0.21
38 C	-0.212982	-0.241836	-0.234740	11.93	0.23
39 N	-0.287851	-0.287406	-0.289028	0.15	0.29
40 C	-0.173340	-0.171860	-0.178051	0.86	0.18
41 C	-0.161307	-0.142331	-0.157202	13.33	0.16
42 C	-0.278868	-0.277346	-0.277181	0.55	0.28
43 C	0.252905	0.250145	0.252898	1.10	0.25
44 C	0.261313	0.260447	0.261223	0.33	0.26
45 C	-0.286049	-0.283921	-0.285457	0.75	0.29
46 C	-0.121917	-0.120164	-0.140107	1.46	0.14

47	H	0.253658	0.252585	0.258679	0.42	0.26
48	H	0.250212	0.252998	0.257112	1.10	0.26
49	H	0.247461	0.250612	0.257120	1.26	0.26
50	H	0.259599	0.263077	0.263346	1.32	0.26
51	H	0.249227	0.252597	0.256820	1.33	0.26
52	H	0.273260	0.286043	0.281155	4.47	0.28
53	H	0.261694	0.277883	0.277650	5.83	0.28
54	H	0.329613	0.333742	0.318643	1.24	0.32
55	N	-0.310384	-0.310842	-0.311133	0.15	0.31
56	N	-0.312704	-0.313014	-0.314262	0.10	0.31
57	C	-0.195325	-0.199442	-0.196164	2.06	0.20
58	C	-0.187298	-0.186265	-0.183341	0.55	0.18
59	C	-0.176412	-0.174460	-0.180748	1.12	0.18
60	C	-0.188516	-0.196955	-0.196954	4.28	0.20
61	C	-0.197203	-0.204816	-0.201067	3.72	0.20
62	C	-0.196654	-0.194718	-0.193829	0.99	0.19
63	C	-0.316516	-0.315126	-0.303687	0.44	0.30
64	C	-0.287225	-0.285790	-0.285014	0.50	0.29
65	C	0.260254	0.257535	0.259911	1.06	0.26
66	C	0.263590	0.262954	0.262521	0.24	0.26
67	H	0.253931	0.255974	0.258496	0.80	0.26
68	H	0.258958	0.262187	0.266716	1.23	0.27
69	H	0.270119	0.273736	0.273599	1.32	0.27
70	H	0.244255	0.248536	0.253166	1.72	0.25
71	H	0.283452	0.298245	0.290880	4.96	0.29
72	H	0.299643	0.301258	0.291266	0.54	0.29
73	H	0.271234	0.264028	0.268039	2.73	0.27
Mean :					4.48	0.25

Table. Mulliken atomic point charges (in a.u.) of the complex intercalated in site #4 of the DNA fragment at different levels of theory: QM/AMBER, QM/CHARMM and QM/AMBER:ERS. The %FF and %ERS columns correspond to the percentage of variation with respect to the QM/AMBER reference for the QM/CHARMM and QM/AMBER:ERS calculations respectively.

$$\%FF = 100 * \left| \frac{(q_{QM/CHARMM} - q_{QM/AMBER})}{q_{QM/AMBER}} \right|$$

$$\%ERS = 100 * \left| \frac{(q_{QM/AMBER:ERS} - q_{QM/AMBER})}{q_{QM/AMBER}} \right|$$