



**INSTITUTO POTOSINO DE INVESTIGACIÓN  
CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA, A.C.**

**POSGRADO EN CIENCIAS APLICADAS**

**Estudio del comportamiento de hidrocarburos  
por medio de simulaciones de dinámica molecular**

Tesis que presenta

**Olga Leticia Ramírez Ramírez**

Para obtener el grado de

**Maestro en Ciencias Aplicadas**

En la opción de

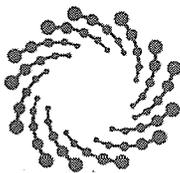
**Nanociencias y Materiales**

**Director de la Tesis:**

Dr. Vladimir Alonso Escobar Barrios

San Luis Potosí, S.L.P., Agosto del 2018





**IPICYT**

## **Constancia de aprobación de la tesis**

La tesis "***Estudio del comportamiento de hidrocarburos por medio de simulaciones de dinámica molecular***" presentada para obtener el Grado de Maestra en Nanociencias y Materiales fue elaborada por **Olga Leticia Ramírez Ramírez** y aprobada el **diez de agosto de dos mil dieciocho** por los suscritos, designados por el Colegio de Profesores de la División de Materiales Avanzados del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

**Dr. Vladimir Alonso Escobar Barrios**  
Director de la tesis

**Dr. Pedro Ezequiel Ramírez González**  
Miembro del Comité Tutorial

**Dr. Haret-Codratian Rosu Barbus**  
Miembro del Comité Tutorial



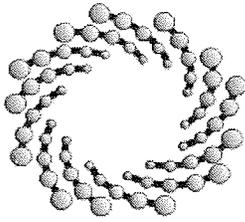


## **Créditos Institucionales**

Esta tesis fue elaborada en la División de Materiales Avanzados del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., bajo la dirección del Dr. Vladimir Alonso Escobar Barrios.

Durante la realización del trabajo el autor recibió una beca académica del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (No. 614286) y del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A. C.





**IPICYT**

# Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

## Acta de Examen de Grado

El Secretario Académico del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., certifica que en el Acta 039 del Libro Primero de Actas de Exámenes de Grado del Programa de Maestría en Nanociencias y Materiales está asentado lo siguiente:

En la ciudad de San Luis Potosí a los 10 días del mes de agosto del año 2018, se reunió a las 10:00 horas en las instalaciones del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., el Jurado integrado por:

<b>Dr. Haret-Codratian Rosu Barbus</b>	<b>Presidente</b>	<b>IPICYT</b>
<b>Dr. Pedro Ezequiel Ramírez González</b>	<b>Secretario</b>	<b>UASLP</b>
<b>Dr. Vladimir Alonso Escobar Barrios</b>	<b>Sinodal</b>	<b>IPICYT</b>

a fin de efectuar el examen, que para obtener el Grado de:

**MAESTRA EN NANOCIENCIAS Y MATERIALES**

sustentó la C.

**Olga Leticia Ramírez Ramírez**

sobre la Tesis intitulada:

*Estudio del comportamiento de hidrocarburos por medio de simulaciones de dinámica molecular*

que se desarrolló bajo la dirección de

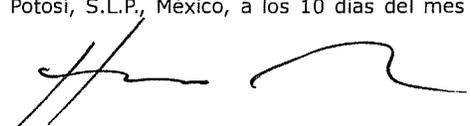
**Dr. Vladimir Alonso Escobar Barrios**

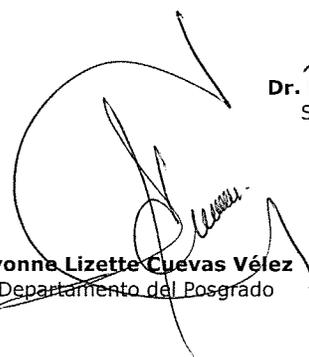
El Jurado, después de deliberar, determinó

**APROBARLA**

Dándose por terminado el acto a las 11:42 horas, procediendo a la firma del Acta los integrantes del Jurado. Dando fe el Secretario Académico del Instituto.

A petición de la interesada y para los fines que a la misma convengan, se extiende el presente documento en la ciudad de San Luis Potosí, S.L.P., México, a los 10 días del mes de agosto de 2018.

  
**Dr. Horacio Flores Zúñiga**  
Secretario Académico

  
**Mtra. Ivonne Lizette Cuevas Vélez**  
Jefa del Departamento del Posgrado



*“...la tecnología le permite al hombre dar el valor económico al conocimiento... La tecnología y la innovación, le dan entonces sentido práctico al conocimiento”...*

**Enrique Rodríguez Aguilar**



# Agradecimientos

Este trabajo no habría sido posible sin el apoyo y estímulo del doctor Vladimir Alonso Escobar Barrios.

Un cordial y profundo agradecimiento al Dr. Pedro Ezequiel Ramirez Gonzalez por soporte y apoyo.

Al Laboratorio Nacional de Ingeniería de la Materia Fuera de Equilibrio por prestar y autorizar el uso de las computadoras en las que se realizó el proyecto.

Olga Ramírez Rodríguez, mi consejera y madre, la cual siempre ha estado a mi lado y el de mis hermanos, apoyándonos, aconsejándonos y amándonos como solo una **grandiosa** madre sabe hacer; de la cual hemos aprendido a siempre afrontar todo con la sonrisa y la cara en alto.

A mi padre Agustín Ramírez que aunque ya no se encuentre entre nosotros, su ideal de buscar la excelencia en todo lo que hacemos, vive con nosotros día a día.

A mis hermanos José, Adan y David que, a su muy particular manera, siempre me han apoyado y consentido para que yo pueda lograr mis objetivos.

Al Dr. Haret-Codratian Rosu Barbus por fungir como sinodal.

A la Dr. Patsy Verónica Ramírez González por proporcionar los datos experimentales obtenidos en el laboratorio que esta a su cargo.

A mis compañeros y amigos de maestría con los cuales debatí, crecí, conviví, aprendí y me divertí (Bianca Estrada, Rene Licea, Elia E. Oliva, Pricila B. Romero, Lorena Garate y Misael Cisneros).

Y a mis compañeros de laboratorio con quienes aprendí que hay otras clases de familia (Yareni, Mariana, Aracely, Karen, Alejandra, Miriam, Valeria, Lupita, Eduardo, Victoria, Mauricio, Elzy, Dalia, Eric, Pablo etc).

A Pricila B. Romero con los peores consejos pero la mejor compañía.

A Daniel Varela por su soporte técnico y amistoso.

Al Dr. Hossein Hejazi por el recibimiento y apoyo para la realización de la estancia en su

laboratorio de medios porosos en la Universidad de Calgary.

A SENER-CONACYT, por el financiamiento para realizar la estancia en la Universidad de Calgary.

This work was supported by the Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT, México) through Grants: 242364, 182132, FC-2015-2-1155, Cátedras CONACyT-1631, Laboratorio Nacional de Ingeniería de la Materia Fuera de Equilibrio-279887-2017 and CB-2015-01-257636.

...”What the material world values does not shine the same in the truth of the soul” ...Jelaluddin Rumi



# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>XVI</b>
<b>Abstract</b>	<b>XVII</b>
<b>Objetivos</b>	<b>XVIII</b>
0.0.1. General . . . . .	XVIII
<b>Introducción</b>	<b>XIX</b>
<b>1. Conceptos Generales</b>	<b>1</b>
1.1. Ingeniería de Yacimientos. . . . .	1
1.2. Petróleo crudo . . . . .	1
1.2.1. Clasificación por grados API . . . . .	1
1.2.2. Composición Química . . . . .	2
1.2.3. Estructura molecular de los hidrocarburos . . . . .	3
1.3. Petróleo crudo pesado y extra-pesado. . . . .	4
1.4. Propiedades del crudo. . . . .	5
<b>2. Simulaciones Computacionales</b>	<b>8</b>
2.1. ¿Porqué usar simulaciones computacionales? . . . . .	8
2.1.1. Química computacional y modelado molecular . . . . .	9
2.1.2. Mecánica estadística . . . . .	9
2.2. Simulación de Dinámica Molecular . . . . .	10
2.2.1. Dinámica molecular . . . . .	10
2.2.2. ¿Porqué usar Simulación de Dinámica Molecular? . . . . .	11
2.2.3. Ventajas de la Dinámica Molecular . . . . .	11
2.2.4. Información requerida para realizar el estudio en dinámica molecular	12
2.3. Interacciones no enlazantes-Fuerzas intermoleculares . . . . .	12
2.3.1. Interacciones no enlazantes . . . . .	12
2.4. Campos de fuerza . . . . .	14
2.4.1. Términos enlazantes . . . . .	15
2.4.2. Campos de Fuerza . . . . .	15
2.5. Condiciones de Forntera-Periódica. . . . .	17
2.6. Topología y Algoritmo de SDM . . . . .	17
2.7. Modelos de agua. . . . .	17

2.7.1.	Modelo SPC . . . . .	18
2.8.	Cálculo de Propiedades. . . . .	18
2.8.1.	Propiedades . . . . .	19
<b>3.</b>	<b>Antecedentes</b>	<b>22</b>
3.1.	Datos- aceite de interes . . . . .	22
3.1.1.	Propiedades del Aceite . . . . .	22
3.1.2.	Calorimetría diferencial de barrido. . . . .	23
3.1.3.	Análisis PVT . . . . .	23
3.1.4.	Análisis Composicional . . . . .	23
3.1.5.	Viscosidad . . . . .	25
3.2.	Antecedentes . . . . .	25
3.2.1.	Simulaciones de dinámica molecular . . . . .	27
<b>4.</b>	<b>Metodología</b>	<b>29</b>
4.1.	Descripción del software y especificación de parámetros utilizados. . . . .	29
4.1.1.	Descripción del software . . . . .	30
4.1.2.	Especificación de parámetros utilizados. . . . .	31
4.2.	Número/tipo de moléculas de los sistemas. . . . .	35
4.3.	Moléculas de hidrocarburos . . . . .	38
4.3.1.	Metodología (esquema desde la construcción hasta la corrida de producción) . . . . .	38
4.3.2.	Construcción de los sistemas . . . . .	42
4.4.	Metodología General . . . . .	42
<b>5.</b>	<b>Resultados</b>	<b>44</b>
5.1.	Moléculas de hidrocarburos. . . . .	44
5.1.1.	Conformación final de las moléculas . . . . .	45
5.1.2.	Energía total . . . . .	49
5.1.3.	Propiedades estructurales. . . . .	50
5.1.4.	Resumen-Discusión . . . . .	54
5.2.	Sistemas con un solo tipo de moléculas . . . . .	55
5.2.1.	Configuración del sistema . . . . .	55
5.2.2.	Propiedades estructurales. . . . .	63
5.2.3.	Propiedades relacionadas a la movilidad de las moléculas en el sistema. . . . .	65
5.2.4.	Propiedades macroscópicas. . . . .	70
5.2.5.	Distribución espacial de las moléculas en el sistema. . . . .	71
5.2.6.	Resumen-Discusión . . . . .	72
<b>6.</b>	<b>Resultados-Mezcla de hidrocarburos</b>	<b>74</b>
6.1.	Gas. . . . .	74
6.1.1.	Disposición de las moléculas en el sistema (Visualización). . . . .	75
6.1.2.	Propiedades estructurales de las moléculas. . . . .	80
6.1.3.	Superficie accesible al solvente. . . . .	82
6.1.4.	Propiedades relacionadas con la movilidad de las moléculas. . . . .	82

6.1.5.	Coeficiente de difusión . . . . .	83
6.1.6.	Distribución espacial de las moléculas. . . . .	84
6.2.	Hidrocarburos livianos. . . . .	94
6.2.1.	Disposición de las moléculas en el sistema (visualización). . . . .	94
6.2.2.	Propiedades estructurales de las moléculas. . . . .	99
6.2.3.	Propiedades relacionadas con la movilidad de las moléculas. . . . .	101
6.3.	Hidrocarburos medio pesados. . . . .	102
6.3.1.	Disposición de las moléculas en el sistema (Visualización). . . . .	102
6.3.2.	Propiedades estructurales de las moléculas . . . . .	107
6.4.	Propiedades macroscópicas. . . . .	111
6.5.	Resumen de resultados. . . . .	112
<b>7.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>114</b>
<b>8.</b>	<b>Perspectivas-Recomendaciones</b>	<b>115</b>
<b>A.</b>	<b>Inputs de las moléculas utilizadas.</b>	<b>116</b>
A.1.	itp files . . . . .	117
<b>B.</b>	<b>Función de distribución radial (g(r)).</b>	<b>164</b>
B.1.	Gas comprimido sin agua (sistema base). . . . .	164
B.2.	Gas comprimido con 25 % de fracción molar de agua. . . . .	168
B.3.	Gas comprimido con 50 % de fracción molar de agua. . . . .	171
B.4.	Gas comprimido con 75 % de fracción molar de agua. . . . .	175
<b>C.</b>	<b>Estancia-Universidad de Calgary- Método Lattice Boltzmann</b>	<b>179</b>
C.1.	Actividades realizadas . . . . .	179
C.2.	Método Lattice Boltzmann . . . . .	180
C.2.1.	Introducción . . . . .	180
C.2.2.	Metodología . . . . .	183
C.2.3.	Resultados . . . . .	184
C.2.4.	Conclusiones . . . . .	189
<b>D.</b>	<b>Glosario</b>	<b>191</b>

# Resumen

En México, una de las principales problemáticas que se presentan en algunos yacimientos petroleros es la alta viscosidad que tiene el aceite del mismo. En la industria y la academia se buscan nuevas alternativas para la optimización en la recuperación del aceite, en el aumento de la vida útil del pozo, la disminución en el gasto energético (requerido para la extracción y transporte del aceite). Esto lleva a los investigadores a mejorar el entendimiento del proceso de extracción del aceite involucrado, tomando en cuenta el gran número de variables que ello conlleva. Debido a que esta clase de sistemas se estudian típicamente a escalas mesoscópicas y macroscópicas, es de gran interés realizar un estudio en aspectos más fundamentales, de esta clase de sistemas complejos, ya que con ello se busca entender el comportamiento e interacción de las moléculas presentes en el sistema, a escalas moleculares, y correlacionarlo con el comportamiento a mayor escala mediante parámetros medibles, como es el caso de la viscosidad. En este trabajo se realizó el estudio de hidrocarburos por medio de simulaciones de dinámica molecular, las simulaciones se realizaron en las computadoras del Laboratorio Nacional de Ingeniería de la Materia Fuera de Equilibrio. Los resultados indican que mediante la simulación de dinámica molecular es posible la predicción de propiedades macroscópicas y el estudio del comportamiento de sistemas de hidrocarburos.

# Abstract

In Mexico, one of the main problems of the petroleum industry is the high viscosity of oil. In the industry and the academy, new alternatives are sought for the optimization for the oil recovery, as well as in the increase of the lifetime of the well, the decrease in the energetic demand (required for the extraction and transport of the oil). This leads researchers to improve the understanding about extraction of the oil involved, taking into account the large number of variables that this entails. Because this class of systems are typically studied at mesoscopic and macroscopic scales, it is of great interest to conduct a study on more fundamental aspects, in order to understand the behavior and interaction of the molecules present in the system, at molecular scales, and correlate this with the behavior on larger scale by means of measurable parameters, such as the viscosity. In this work, the study of hydrocarbons was carried out by means of simulations of molecular dynamics, such simulations were carried out using the computers of the National Laboratory of Engineering of the Matter Out of Balance. The results indicate that through the simulation of molecular dynamics, it is possible to predict macroscopic properties and study the behavior of hydrocarbon systems.

# Objetivos

## 0.0.1. General

Mostrar la importancia y factibilidad que ofrece el uso de herramientas computacionales, para el estudio y el entendimiento de hidrocarburos.

### Específicos

- Entender el comportamiento del crudo usando simulaciones de dinámica molecular.
- Realizar la elección del campo de fuerza adecuado para el estudio de sistemas de hidrocarburos.
- Evaluar y contruir las moléculas de hidrocarburos a utilizar para los diferentes sistemas.
- Evaluar como las simulaciones de dinámica molecular permite la elección en las condiciones para la simulación.
- Estudiar las propiedades para los diferentes hidrocarburos en sistemas con un solo tipo de molécula.
- Evaluar propiedades macroscópicas como el caso de la densidad para los sistemas de un solo tipo de molécula, y realizar la comparación con datos reportados experimentalmente.
- Estudiar las propiedades para los diferentes hidrocarburos en sistemas de mezclas complejas así como la distribución espacial del mismo.
- Estudiar los sistemas de mezclas de hidrocarburos a diferentes concentraciones con agua.
- Realizar la evaluación de propiedades macroscopicas como densidad y viscosidad para los sistemas simulados.

# Introducción

La principal intención de los modelos matemáticos es obtener una forma simple y eficiente de poder reproducir lo observado experimentalmente tomando en cuenta específicas condiciones o parámetros del sistema.

Gracias al avance la tecnología y, en especial al avance en los últimos años de la capacidad de cómputo, se ha facilitado para los investigadores la comprobación y mejora de los modelos matemáticos propuestos que tratan de reproducir lo observado en la realidad. Esto a su vez permite que dichos modelos se vayan aproximando más y más a la realidad, buscando la simplificación de los sistemas (reducción de variables) pero aumentando la confiabilidad y reproducibilidad de los resultados.

Uno de los principales objetivos en la industria petrolera es lograr la caracterización detallada de los yacimientos para definir los modelos estáticos y dinámicos representativos que describen las heterogeneidades del yacimiento y su influencia sobre el flujo de fluidos en el medio poroso, aspectos que tiene gran impacto en la determinación del volumen original de hidrocarburos, es decir, con esta información se pueden indicar patrones de flujo y barreras impermeables así como la distribución de los poros y los fluidos intersticiales, detectar presiones anormales, evaluar los esfuerzos a los que está sujeta la roca, detectar y definir fracturas, y todo ello con el fin de calcular reservas y crear un plan de desarrollo óptimo de explotación del campo. La administración integral de yacimientos requiere de un plan dinámico.

En México, una de las principales problemáticas que se presentan en algunos yacimientos petroleros es la alta viscosidad que tiene el aceite del mismo. En la ingeniería de yacimiento se busca la optimización constante para la explotación del pozo, lo que conlleva una rápida recuperación de aceite, una larga vida útil del pozo, la disminución en el gasto energético requerido para la extracción y transporte del aceite, por lo que los investigadores buscan nuevas alternativas para el estudio, entendimiento y extracción del aceite involucrado, tomando en cuenta un gran número de variables que ello conlleva.

El petróleo se puede considerar como una mezcla compleja, debido a que está compuesta de hidrocarburos de diferentes pesos moleculares, heteroátomos, sólidos, gases, líquidos, entre otros componentes, por lo que el estudio para entender el comportamiento de dichas mezclas se ha realizado principalmente a grandes escalas. Debido a que esta clase de sistemas únicamente se han estudiado a escalas mesoscópicas y macroscópicas, es de gran interés realizar un estudio en aspectos más fundamentales de esta clase de sistemas complejos como el crudo pesado, ya que se entenderían el comportamiento e interacción de las moléculas presentes en el sistema, a escalas moleculares, y correlacionar ello con el comportamiento a mayor escala mediante parámetros medibles, como es el caso de la viscosidad.

En la literatura se han estudiado los hidrocarburos de formas moleculares pero no con más

de cinco tipo de moléculas diferentes en el sistema, básicamente lo que se ha buscado en dichos estudios (independientemente del modelo utilizado) es el reproducir alguna de las propiedades de ciertas mezclas, tales como densidad o viscosidad, y comparar con lo que se ha observado experimentalmente. [1].

Existiendo una gran cantidad de modelos matemáticos que buscan representar de forma adecuada el comportamiento de las moléculas, para esta tesis se decidió trabajar con el caso de dinámica molecular, la cual consiste básicamente en resolver las ecuaciones de Newton para cada átomo del sistema, por lo que es un modelo con base únicamente en mecánica clásica, donde la información de las fuerzas interactuantes de largo alcance y las fuerzas enlazantes se encuentran incluidas en la elección del campo de fuerza y en las condiciones en las cuáles se va estudiar el sistema.

Para el caso de esta tesis se va a considerar el sistema complejo que es el petróleo y se va a estudiar el comportamiento en la viscosidad del mismo y la relación de ésta con el comportamiento a nivel molecular de sus componentes. La tesis consiste en 5 secciones principales: 1,2,3) conceptos básicos para lograr atender y dar contexto a la misma, 4) antecedentes donde se explica la procedencia de los datos composicionales a tener en cuenta y los trabajos previos en el área de las simulaciones para el caso de hidrocarburos, 5) la metodología utilizada para todos los sistemas; la sección 6 presenta y discute los resultados y finalmente en la sección 7 las conclusiones y perspectivas del trabajo.

En anexos se encuentran las cartas de los convenios con los laboratorios nacionales que nos hicieron el favor de prestar sus equipos de cómputo, y lo realizado en la estancia académica en la Universidad de Calgary.

# Capítulo 1

## Conceptos Generales

### 1.1. Ingeniería de Yacimientos.

Una de las principales razones de la existencia de la ingeniería de yacimientos es hacer una adecuada estimación de la cantidad de hidrocarburos y la predicción del decaimiento de las reservas. En el capítulo actual (1), se revisarán algunos de los conceptos importantes a tener en cuenta cuando se habla de petróleo, así como también se abordan generalidades sobre su composición química y propiedades.

### 1.2. Petróleo crudo

El término petróleo deriva de la palabra “petroleum” del latín, la cuál significa “aceite de piedra”.

El petróleo es una mezcla compleja, compuesta de gases, líquidos y composiciones sólidas de hidrocarburos; éste se encuentra en depósitos de roca sedimentaria y también contiene escasas cantidades de compuestos con nitrógeno, oxígeno, sulfuro y trazas de constituyentes metálicos (Bstougeff, 1967; Colombo, 1667; Hobson y Pohl, 1973; Thornton, 1977; Considine y Considine, 1984).

Las propiedades físicas y químicas del crudo depende en gran medida de su composición y origen.

#### 1.2.1. Clasificación por grados API

El crudo puede diferir en sus características físicas y químicas, por lo cual una forma general y simple de clasificarlo es mediante su gravedad API.

## Densidad API.

La densidad API, de sus siglas en inglés “American Petroleum Institute”, es una medida de la densidad, que describe cuán pesado o liviano es el petróleo en relación al agua.

Para el cálculo de la densidad API se utiliza la medición superficial de la **gravedad específica** del petróleo desgasificado. La fórmula que relaciona la gravedad específica (SG) a 60 °F con la densidad API se muestra en la siguiente expresión (1.1):

$$\text{Densidad API} = \left( \frac{141,5}{SG} \right) - 131,5 \quad (1.1)$$

El petróleo de acuerdo a su densidad API se puede clasificar en: **superligero, ligero, mediano, pesado y extrapesado**, en la Tabla 1.2.1 se muestra a qué grados API corresponde cada caso y cuál es la densidad en g/cm<sup>3</sup> correspondiente.

Aceite crudo	Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	Densidad °API
Super ligero	< 0.83	> 39.0
Ligero	0.87-0.83	31.1-39.0
Mediano	0.92-0.87	22.3-31.1
Pesado	1.0-0.92	10.0-22.3
Extra-pesado	> 1.0	< 10.0

Para esclarecer adecuadamente la relación de la densidad API con el comportamiento del crudo, se puntualiza que la viscosidad del crudo es inversamente proporcional a la densidad API, **lo que quiere decir que al disminuir su densidad en grados API aumenta su viscosidad** (ver Tabla 1.2.1).

Por el peculiar interés del tema de tesis, se va ahondar más sobre las características del petróleo pesado y extra-pesado.

### 1.2.2. Composición Química

Como ya se mencionó en secciones anteriores, la composición del crudo influye en el comportamiento de éste; principalmente tiene a los hidrocarburos, las impurezas y los sólidos (metales) [2].

#### Componentes presentes en el petróleo:

1. **Hidrocarburos:** Compuestos orgánicos que contiene solamente hidrógeno y carbono. Estos se pueden subclasificar de acuerdo al tipo de enlace y estructura que presentan, en:
  - Alifáticos: Hidrocarburos de cadena sencilla, pueden presentar ramificaciones.
    - *Alcanos:* Son los hidrocarburos saturados, presentan enlaces simples (ejem Parafinas) (C<sub>n</sub>H<sub>2n+2</sub>).

- *Alquenos*: Hidrocarburos insaturados, presentan enlaces dobles (ejem Olefinas) ( $C_nH_{2n}$ ).
- *Alquinos*: Hidrocarburos sobre-insaturados presentan enlaces triples ( $C_nH_{2n-2}$ ).
- **Cicloalifáticos**: Hidrocarburos cíclicos.
  - Cicloalcanos: naftenos ( $C_nH_{2n}$ ).
  - Cicloalquenos
  - Cicloalquinos
- **Aromáticos**: hidrocarburos cíclicos conjugados ( $C_nH_{2n-6}$ ).

## 2. Impurezas

- Azufre
- Oxígeno

## 3. Sólidos

- Vanadio
- Níquel
- Otros

Se ha reportado que el contenido de heteroátomos (S, N, O, metales) en los hidrocarburos se incrementa conforme el crudo es más pesado. En México se ha observado que el contenido de azufre es inversamente proporcional a los grados API [3].

De los elementos considerados como impurezas, la presencia del azufre en el crudo es de gran importancia debido a que dependiendo de la proporción en la que se encuentra da información de la calidad del crudo. Esto se debe a que a mayor presencia de azufre el costo de refinamiento de es mayor. El contenido de azufre en el crudo tiene su propia escala de clasificación, dependiendo del porcentaje en peso del azufre presente en el crudo, se denomina: crudo “dulce” si contiene  $< 0.5\%$  (petróleo de alta calidad), entre  $0.5$  y  $1.5\%$  son “semi-amargos” y con  $> 1.5\%$  son “amargos”.

### 1.2.3. Estructura molecular de los hidrocarburos

Como el principal componente del crudo (más abundante y básicamente lo que lo define) es la existencia de los hidrocarburos en el mismo, se va a extender un poco la descripción de los mismos.

Básicamente los hidrocarburos son moléculas resultantes de la unión de átomos de carbono con átomos de hidrógeno formando cadenas que pueden ser abiertas (lineales) o cerradas (ciclos) y cuyos eslabones pueden estar unidos por enlaces simples o por enlaces múltiples. Aquellos hidrocarburos que únicamente presentan enlaces simples reciben el nombre de hidrocarburos saturados (con los cuales se ha trabajado en esta tesis) también conocidos como

alcanos. Todos los enlaces C — H tienen la misma longitud igual a 1,06 Å, mientras que el enlace C — C, de características electrónicas diferentes, presenta un valor superior e igual a 1,54 Å. Las cadenas de los hidrocarburos saturados pueden también cerrarse formando estructuras cíclicas.

Los hidrocarburos no saturados se caracterizan, por la presencia de enlaces dobles (alquenos) o triples (alquinos). La existencia de un doble enlace modifica considerablemente la geometría de la molécula de eteno respecto de la de etano, ya que ahora los ángulos de enlace HCH y HCC son iguales a 120° como corresponde a una estructura plana, además la longitud de enlace C — C se acorta. A diferencia de lo que sucede con un enlace sencillo, un enlace múltiple impide la libre rotación de la molécula en torno a él y le confiere, por tanto, cierta rigidez.

Los hidrocarburos presentan propiedades físicas y químicas que se derivan a su estructura. Así, los hidrocarburos saturados, debido a la ausencia de dobles enlaces, se caracterizan por su escasa reactividad.

En condiciones ambientales los cuatro primeros miembros de la serie son gases incoloros, pero a medida que aumenta el número de grupos  $CH_2$  adicionales los hidrocarburos aumentan su punto de fusión, lo que les hace ser líquidos y sólidos en esas mismas condiciones.

Por ejemplo, la gasolina contiene, entre otros componentes, una mezcla de hidrocarburos líquidos; y la parafina es, en esencia, una mezcla de hidrocarburos sólidos a temperatura ambiente.

Sin embargo, junto con los enlaces C — C y C — H de los hidrocarburos saturados, que se caracterizan por su estabilidad, otros diferentes grupos atómicos pueden estar presentes en las cadenas hidrocarbonadas, dando lugar a distintos tipos de moléculas orgánicas.

Estos grupos atómicos que incrementan y modifican, de acuerdo con su composición, la capacidad de reacción de los hidrocarburos se denominan grupos funcionales. En ellos figuran elementos tales como el oxígeno, el nitrógeno o el azufre, que hacen de los grupos funcionales auténticos centros reactivos de la molécula. Los principales grupos funcionales son hidroxilos, carbonilos, carboxilo, amino, etc.

### **1.3. Petróleo crudo pesado y extra-pesado.**

Dada la abundancia de las reservas de petróleo pesado, las compañías que actualmente se concentran en la producción de petróleos convencionales están ingresando en el ámbito del petróleo pesado, uniéndose a otras empresas que producen petróleo pesado desde hace varias décadas.

Si bien la densidad del petróleo es importante para evaluar el valor del recurso y estimar el rendimiento y los costos de recuperación, la propiedad del fluido que más afecta la producción y la recuperación, es la viscosidad del petróleo. Cuanto más viscoso es el petróleo, más difícil resulta extraerlo y refinarlo. No existe ninguna relación estándar entre densidad y viscosidad, pero los términos "pesado" y "viscoso" tienden a utilizarse en forma indistinta para descri-

bir los petróleos pesados, porque los petróleos pesados tienden a ser más viscosos que los petróleos convencionales. La viscosidad de los petróleos convencionales puede oscilar entre 1 centipoise (cP) (0.001 Pa.s) (la viscosidad del agua) y aproximadamente 10 cP (0.01 Pa.s). La viscosidad de los petróleos pesados y extrapesados puede actuar entre 10 cP (0.02 Pa.s) y más de 1,000,000 cP (1,000 Pa.s). El hidrocarburo más viscoso, el bitumen, es un sólido a temperatura ambiente y se ablanda fácilmente cuando se calienta. Como el petróleo pesado es menos valioso, ya que es más difícil de producir y más difícil de renar que los petróleos convencionales, surge la pregunta acerca del porqué del interés de las compañías petroleras en comprometer recursos para extraerlo. La primera parte de la respuesta, que consta de dos partes, es que ante la coyuntura actual, muchos yacimientos de petróleo pesado ahora pueden ser explotados en forma rentable. La segunda parte de la respuesta es que estos recursos son abundantes. El total de recursos de petróleo del mundo es de aproximadamente  $9 \text{ a } 13 \times 10^{12}$  (trillones) de barriles (1.4 a 2.1 trillones de  $m^3$ ) El petróleo convencional representa sólo el 30% aproximadamente de ese total, correspondiendo el resto a petróleo pesado, extrapesado y bitumen [2]. El petróleo pesado promete desempeñar un rol muy importante en el futuro de la industria petrolera y muchos países están tendiendo a incrementar su producción. El petróleo pesado y extra-pesado representan el 70% de las reservas del mundo [3]. Se denominan crudos extra-pesados a aquellos que presentan valores menores a  $10^\circ \text{API}$ , mientras que los crudos pesados exhiben densidades menores a  $20^\circ \text{API}$  [4]. Estos crudos tienen la característica de presentar una baja gravedad API (alta densidad) y una alta concentración de azufre (S), así como alta viscosidad; sin embargo la cantidad de azufre, asfaltenos y metales presentes depende principalmente de su origen [5]. Para estos casos la producción, transportación y refinación manifiestan un mayor número de problemas, debido a que fluye bien a las condiciones del yacimiento sin embargo en la superficie se vuelve pastoso, lo cual lo coloca como petróleo no-convencional (el convencional se comporta igual en superficie y yacimiento).

## 1.4. Propiedades del crudo.

La propiedades de los fluidos dependen de la composición de los hidrocarburos, la presión y la temperatura. Entre estas propiedades encontramos:

### 1. PRESIÓN DE BURBUJEO.

Presión a la cual se forma la primera burbuja de gas al pasar un sistema del estado líquido al estado de dos fases (líquido-gas), donde la fase líquida está en equilibrio con una cantidad infinitesimal de gas libre.

### 2. FACTOR VOLUMÉTRICO DEL PETRÓLEO.

Volumen que ocupa condiciones de yacimiento un barril normal de petróleo más el gas en solución, este factor se obtiene mediante la siguiente expresión 1.2:

$$B_o = \frac{\text{Volumen de(petróleo + gas disuelto)@Py, Ty (BY)}}{\text{Volumen de petróleo @ CN (BN)}} \quad (1.2)$$

Donde:

Bo: Factor Volumétrico del petróleo, (BY/BN)

Ty: Temperatura de yacimiento, (°F)

Py: Presión del yacimiento, (Ipc)

### 3. FACTOR VOLUMÉTRICO DEL GAS.

Volumen de barriles que un pie cúbico normal de gas ocupa como gas libre en el yacimiento a las condiciones de presión y temperatura prevalecientes, y este se obtiene por la siguiente expresión 2.3:

$$B_g = \frac{\text{Volumen de gas libre @Py, Ty (BY)}}{\text{Volumen de gas libre @ CN (BN)}} \quad (1.3)$$

### 4. FACTOR VOLUMÉTRICO TOTAL (Ó BIFÁSICO).

Volumen en barriles que ocupa a condiciones de yacimiento un barril normal de petróleo más su gas originalmente en solución. El factor bifásico se obtiene por la siguiente ecuación 2.4

$$B_t = \frac{\text{Volumen de (petróleo + gas disuelto + gas liberado)@Pb}}{\text{Volumen de petróleo @ CN (BN)}} \quad (1.4)$$

Donde la relación del factor volumétrico total (Bt), el factor volumétrico del gas (Bg) y el factor volumétrico del petróleo (Bo) es:

$$B_t = B_o + (R_{si} - R_s) * B_g \quad (1.5)$$

Donde

Bo: Factor Volumétrico del petróleo, (BY/BN).

Rsi: Razón gas disuelto-petróleo a la Pb, (PCN/BN).

Rs: Razón gas disuelto-petróleo a la presión de interés, (PCN/BN).

Bg: Factor volumétrico del gas, (PCY/PCN).

Pb: Presión de burbujeo, (Icp).

### 5. COMPRESIBILIDAD (Ó COEFICIENTE ISOTÉRMICO).

Es el cambio unitario de volumen con variación de presión a temperatura constante, como se muestra en la siguiente expresión:

$$C_o = \frac{\ln B_{ob} - \ln B_o}{P - P_b} \quad (1.6)$$

Donde

Bob: Factor Volumétrico en el punto de burbuja, (BY/BN).

Bo: Factor Volumétrico del petróleo a determinada presión, (BY/BN).

Pb: Presión de saturación o burbuja, (Ipc).

P: Presión tomada por encima de la presión de o burbuja, (Ipc).

### 6. VISCOSIDAD.

Fricción interna o resistencia ofrecida por el fluido al movimiento relativo de sus partes. La viscosidad representa la característica de fluidez.

Factores que afectan la Viscosidad

- Temperatura: La viscosidad disminuye con el aumento de la temperatura
- Gas disuelto: La viscosidad disminuye con el aumento de la razón del gas disuelto
- Presión: La viscosidad aumenta al aumentar la presión.

# Capítulo 2

## Simulaciones Computacionales

Las simulaciones computacionales se refiere el hecho de poder emular un sistema real en el ordenador de forma controlada, esto sirve para contestar preguntas, reducir las variables, y encontrar una solución al problema, las simulaciones computacionales se encuentran desarrollando a grandes zancadas en todas las áreas del conocimiento, desde en economía para predecir el comportamiento de la bolsa hasta medicina donde se pueden buscar problemas cardiacos o evolución de enfermedades. Donde una de las principales funciones de las simulaciones computacionales es la validez de un modelo al comparando los resultados numéricos con los experimentales.

### 2.1. ¿Porqué usar simulaciones computacionales?

El entendimiento de las propiedades estructurales, comportamiento de respuesta y por ende de las interacciones entre los materiales (o moléculas involucradas), son esenciales para poder diseñar adecuadamente los experimentos, procedimientos, protocolos y técnicas a utilizar, disminuyendo así los tiempos y costos involucrados.

Esta necesidad de encontrar la forma de entender el comportamiento de los sistemas y a su vez la disminución en los costos, ha llevado al hombre al diseño y uso práctico de modelos teóricos que tengan la capacidad de reproducir/explicar/predecir los fenómenos experimentales/producción, estos presenta una gran ventaja debido a que permite predecir el comportamiento y de alguna manera busca explicar lo que está ocurriendo en el sistema.

Entonces todo la interacción entre los materiales se reduce a las interacciones físicas a nivel molecular, la búsqueda del entendimiento a niveles moleculares ha generado la creación de diferentes modelos matemáticos con sus respectivas restricciones y asertividades con respecto a lo reportado, **se busca que los modelos permiten entender lo que ocurre a escala molecular y de esa manera puentear y predecir lo que ocurre a macro escalas**, para así tener mayor control en los experimentos o procesos industriales.

### **2.1.1. Química computacional y modelado molecular**

La química computacional es un término que indica el uso de técnicas computacionales para la química, que va desde la mecánica cuántica de moléculas a la dinámica de grandes agregados moleculares complejos.

Como tal el modelado molecular indica en general procesos que describen complejos sistemas químicos en términos de modelos atomísticos realistas, con el objetivo de entender y predecir propiedades macroscópicas basadas en el detalle del conocimiento a escala atomística; regularmente el modelado molecular se utiliza para diseñar nuevos materiales, por lo cual para que la predicción sea precisa se requiere conocer propiedades de sistemas realistas [6]. Las propiedades macroscópicas que se pueden distinguir a partir de (a) las propiedades en el estado de equilibrio, tales como la constante de unión de un inhibidor a una enzima, la energía potencial promedio de un sistema, o la función de distribución radial de un líquido, y (b) las propiedades dinámicas (estado fuera de equilibrio), tales como la viscosidad de un líquido, procesos de difusión de membranas, dinámica de los cambios de fase, reacciones cinética o dinámica de los defectos de un cristal [7]. La selección de técnicas a utilizar depende de la pregunta y la viabilidad del método para obtener resultados fiables.

Las propiedades macroscópicas son siempre los promedios sobre la estadística del ensamble en sistemas moleculares.

La simulación molecular en principio provee detalles atómicos de la estructura y movimiento, tales que los detalles no son relevantes para las propiedades macroscópicas de interés. Esto abre la ventana para simplificar la descripción de las interacciones y el promedio sobre los detalles irrelevantes. La ciencia de la mecánica estadística provee el trasfondo para dichas simplificaciones.

Para la generación de ensambles representativos en equilibrio hay dos métodos disponibles: (a) simulación de monte carlo y (b) simulación de dinámica molecular. Para la simulación de ensambles fuera de equilibrio para el análisis de eventos dinámicos el único apropiado es el método de simulación de dinámica molecular.

### **2.1.2. Mecánica estadística**

La física (o mecánica) estadística es una rama de la física que mediante la teoría de la probabilidad es capaz de deducir el comportamiento de los sistemas físicos macroscópicos a partir de ciertas hipótesis sobre las partículas que lo conforman y sus interacciones [8]. El estado termodinámico de un sistema queda definido por un conjunto de parámetros (número de partículas, volumen, temperatura, energía, etc) [9] y otras propiedades pueden ser derivadas del sistema (densidad, presión, capacidad calorífica, etc). Muchas de las propiedades macroscópicas del sistema pueden ser descritas en términos de promedios, debido a esto es importante que las simulaciones de dinámica molecular generen suficientes configuraciones para que una cantidad mayor del espacio sea muestreado y que el promedio en el ensamble (ensamble= colección de puntos en el espacio multidimensional) sea igual al promedio en el tiempo.

## 2.2. Simulación de Dinámica Molecular

La simulación de dinámica molecular (SDM) es un campo multidisciplinario debido a que es la conjunción de leyes y teorías tanto como matemáticas, físicas y químicas. Es un método en el cual el trasfondo está en base a la mecánica clásica para describir el movimiento de los átomos.

### 2.2.1. Dinámica molecular

La dinámica molecular (DM) es un método que permite generar las trayectorias de un sistema compuesto por N partículas por integración numérica directa de las ecuaciones de movimiento de Newton, con especificaciones de un potencial de interacción interatómico de condiciones iniciales y de frontera adecuadas, es un método de modelado y simulación atomístico cuando las partículas en cuestión son los átomos que constituyen el material o sistema de estudio.

En el diagrama de la Figura 2.1 se puede apreciar de forma general el algoritmo de MD.

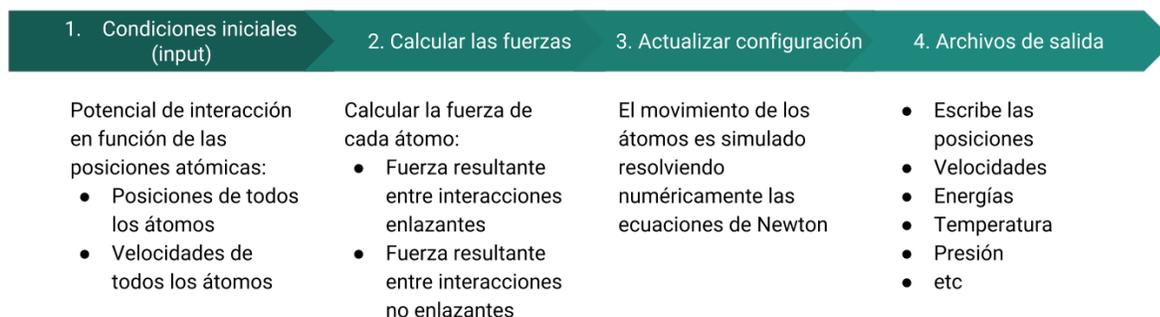


Figura 2.1: Algoritmo general de Dinámica molecular

En el diagrama 2.1, tenemos el algoritmo básico de SDM, para una corrida de producción de cualquier sistema (pasos que se van a realizar de manera automática dependiendo del software). Sin embargo si hablamos de las etapas a seguir en SDM para tener un buenos datos de salida de la corrida de producción inicia desde la construcción de los archivos de entrada (configuraciones espaciales de las partículas) etapas principales de la SDM; (1) el programa lee la información de la configuración inicial del sistema la cual involucra las posiciones, velocidades, energías entre otros datos, en este paso las velocidades iniciales de las partículas son ajustadas para que el momento total del sistema sea cero, (2) la equilibración la cual tiene como propósito dejar evolucionar el sistema hasta que alcance su estado de equilibrio, los parámetros para caracterizar que el sistema llegó a este estado son las energías (cinética, potencial, total), también se monitorean velocidades, presiones y temperaturas y (3) Producción, una vez alcanzado el equilibrio se deja evolucionar el sistema cierto número de pasos, esta etapa es la que se utiliza para hacer los cálculos de las propiedades.

### 2.2.2. ¿Porqué usar Simulación de Dinámica Molecular?

El avance de la tecnología y la inmersión de los trabajos experimentales a escalas cada vez más pequeñas han llevado a la necesidad e interés de entender los materiales a escala molecular. El avance en la parametrización de cálculos y capacidad de cómputo a permitido la posibilidad del desarrollo de alternativas para el estudio de los materiales, tales como el uso de modelos físico-matemáticos para la reproducibilidad en el comportamiento de los materiales. Al aumentar la capacidad de cómputo, se han hecho cada vez más útiles y precisas al comparar los resultados con trabajos experimentales

Una de dichas alternativas es la Simulación de Dinámica Molecular (SDM). La SDM es una herramienta computacional que permite analizar el comportamiento o evolución de un sistema a través del tiempo, en esencia, genera las trayectorias de un sistema utilizando las especificaciones de un potencial de interacción atómico, condiciones iniciales y de frontera. Entonces SDM es un método apropiado para la generación de ensamblajes de no-equilibrio y para el análisis de eventos numéricos a escalas atómicas [10]. Entonces SDM permite tener un puente entre el experimento, las interacciones moleculares y los modelos.

En la actualidad SDM se aplica para el análisis de prácticamente cualquier sistema fisico-químico de interés pero es necesario tener una buena configuración inicial. Se ha usado SDM para estudios de diferente índole tales como: cambios de fase, solubilidad de moléculas, viscosidad de líquidos, pegamentos, entendimiento de sistemas biológicos, diseño de fármacos, para fluidos se puede establecer la temperatura de fusión o evaporación; por lo que resulta un método de simulación molecular muy versátil.

### 2.2.3. Ventajas de la Dinámica Molecular

A diferencia de otros métodos que permiten únicamente simular un estado o una etapa del sistema a, Dinámica Molecular (DM) brinda la información del sistema a través del tiempo, también cómo se consideran las velocidades de los átomos es posible calcular la energía cinética (otros programas sólo calculan la energía potencial y la energía libre), permite observar cambios conformacionales de las moléculas, se pueden incluir diferentes clases de moléculas en el solvente, regular las condiciones del sistema (temperatura, presión), se puede hacer la implementación de otras identidades químicas, pero esto aumenta la complejidad del sistema y los tiempos de simulación [10].

**DM funge como vínculo entre la teoría pura y la experimentación, y facilita el análisis estructural y dinámico de materiales .**

En primera instancia SDM se podría realizar en cualquier computadora, pero al aumentar el número de átomos y la complejidad de las moléculas involucradas aumenta la demanda computacional para poder simular el sistema por lo que van aumentando los requerimientos necesarios y los tiempos de simulación.

#### **2.2.4. Información requerida para realizar el estudio en dinámica molecular**

La exactitud de la simulación depende de la capacidad del potencial de interacción de reproducir el comportamiento del sistema a determinadas condiciones. Es por eso que la confiabilidad de los resultados en las simulaciones depende de si las fuerzas interactuantes de las partículas durante la simulación son parecidas a las fuerzas del sistema real.

Para esta clase de estudios teóricos es necesario una configuración inicial del sistema (posiciones iniciales de los átomos que lo conforman), como la calidad de los resultados depende de la información inicial o datos de entrada (inputs), siempre es necesario recurrir a fuentes de información (experimentales/teóricas) para hacer una adecuada selección de los parámetros. Se requiere conocimiento teórico básico sobre mecánica estadística, campos de fuerza para hacer una adecuada elección y que los resultados obtenidos en las simulaciones sean comparables a los datos reportados experimentales y realmente estén reproduciendo el comportamiento del sistema.

### **2.3. Interacciones no enlazantes-Fuerzas intermoleculares**

Las Fuerzas Intermoleculares, que surgen de fuerzas electromagnéticas, es decir de interacciones atractivas y repulsivas; se encarga de definir las propiedades macroscópicas de la materia.

El comportamiento de un sistema está determinado principalmente por el tipo de interacción existente entre los componentes del mismo. Por lo que para una simulación uno de los parámetros (principales) a tener en cuenta son las fuerzas de interacción consideradas en el modelo y esto a su vez determina el alcance de la información proporcionada por la simulación, el tipo de resultados, la confiabilidad y la cercanía con el comportamiento del sistema real.

En la siguiente sección se hará una breve descripción de aquellas interacciones no enlazantes que se consideran en SDM.

#### **2.3.1. Interacciones no enlazantes**

Los términos no enlazantes quedan definidos por un término de atracción-repulsión de tipo Lennard-Jones para las fuerzas de van der Waals y un término Coulómbico para las interacciones electrostáticas.

- **Potencial de Lennard-Jones (LJ)**

El potencial de LJ fue propuesto en 1924 por el matemático y físico teórico inglés John Lennard-Jones, LJ es un modelo matemático que logra representar el comportamiento de las fuerzas atractivas y repulsivas entre partículas dependiendo de la distancia a la que se encuentren entre ellas [11].

LJ engloba la fuerza de Van Der Waals o fuerza de dispersión relacionada con la fuerza atractiva entre partículas a grandes distancias y a su vez una fuerza de repulsión (conocida como repulsión de Pauli) entre partículas a distancias pequeñas el cual es el resultado de la sobreposición de los orbitales electrónicos.

En la expresión que representa LJ (2.1) tenemos la relación entre la profundidad del potencial ( $\epsilon$ ), la distancia (finita) en la que el potencial entre partículas es cero ( $\sigma$ ) y la distancia entre partículas ( $r$ ), donde el primer término describe la repulsión y el segundo la atracción entre las partículas.

(2.1)

Los parámetros pueden ser ajustados para lograr reproducir adecuadamente los datos experimentales o pueden ser deducidos de resultados muy precisos de cálculo de química cuántica. El potencial LJ es una aproximación, el término que describe la repulsión no tienen una justificación teórica y físicamente está relacionado al principio de Pauli. Se puede apreciar la forma del potencial con la línea sólida de la Gráfica ?? vemos la forma del potencial de LJ, la línea de guiones representa el primer término del modelo (parte repulsiva) y la línea punteada el segundo término (parte atractiva) del modelo. En el modelo (línea roja) se puede ver como cuando  $r$  tiende a infinito el potencial es atractivo y en  $r^{-6}$  la cual corresponde a la dispersión de London, tenemos un  $r_{min}$  donde las interacciones son repulsivas y cuando  $r > r_{min}$  las interacciones repulsivas se vuelven atractivas. Con forme  $r$  tiende a cero el potencial se vuelve repulsivo tal como  $r^{-12}$  lo que corresponde al principio de Pauli.

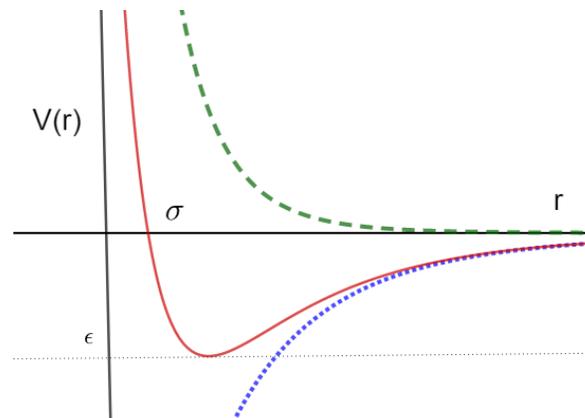


Figura 2.2: La línea sólida es la forma del potencial de Lennard-Jones, la línea de guiones representa el primer término del modelo ( $(\frac{\sigma}{r})^{12}$ ) y la línea punteada el segundo término ( $(\frac{\sigma}{r})^6$ )

### ■ Interacciones Coulombicas

La distribución de carga de una molécula puede ser representada utilizando cargas puntuales fraccionales normalmente centradas en los núcleos, las cuales han sido optimizadas para reproducir las propiedades electrostáticas de la misma [12, 13].

La interacción electrostática queda, representada por la ley de Coulomb

$$E_{ele} = \sum_i \sum_{j>i} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (2.2)$$

donde  $q_i$  y  $q_j$  son las cargas puntuales de cada átomo,  $r_{ij}$  la distancia entre átomos y  $\epsilon$  la constante dieléctrica del medio. En dinámica molecular se considera cierta distancia de corte (cut-off) para después de esta despreciar las interacciones de largo alcance, para eso también considera ciertos algoritmo para hacer las correcciones al potencial. Debido que al considerar las interacciones Coulombicas se deben considerar las interacciones entre partículas de la caja central y todas las imágenes periódicas, se utiliza un método llamado la suma de Ewald, la cual convierte la energía potencial electrostática total ( la cual es una suma que converge lento) a una suma que converge rápido (debido al método).

Entonces las interacciones no enlazantes se engloban en la selección adecuada de las restricciones de corte (cut-off), este indica el radio de corte utilizado para truncar las interacciones no enlazantes, y una de las restricciones para la elección del cut-off es considerar que este no puede exceder la mitad del vector de caja más corto (ya que de ser así implicaría que el átomo tenga la posibilidad de interactuar consigo mismo).

## 2.4. Campos de fuerza

Todo sistema simulado se encuentra en movimiento, donde lo que determina dicho movimiento es el "Campo de fuerzas". El campo de fuerza es el conjunto de parámetros y funciones matemáticas que describen la energía potencial de un sistema de partículas. Describe los enlaces covalentes, el doblamiento de enlaces, los ángulos de torsión, las interacciones electrostáticas y las fuerzas de van der Waals.

Los campos de fuerzas generalmente se parametrizan para reproducir propiedades estructurales. Para el caso de SDM dichas fuerzas son calculadas como el gradiente de la función de energía potencial la cual depende de las posiciones relativas entre las partículas; dicho potencial se escribe como una función que únicamente depende de las distancias relativas entre partículas y de esta forma tenemos el gradiente del potencial con respecto a los desplazamientos.

Estos potenciales buscan representar el fenómeno real por lo que contienen información relevante del sistema de estudio. Los términos que encontramos en todos los campos de fuerzas términos enlazantes incluyen contribuciones debidas a los enlaces covalentes, los ángulos de enlace y las torsiones propias e impropias. Los términos no enlazantes quedan definidos por un término de atracción-repulsión de tipo Lennard-Jones para las fuerzas de van der Waals y un término Coulómbico para las interacciones electrostáticas. Además de estos términos, la mayoría de los campos de fuerzas permiten la inclusión de otros parámetros especiales, como las restricciones de posición o términos asociados a la energía de polarización.

En la sección anterior se hizo una descripción de las fuerzas de interacción no enlazantes (2.3.1), solo haremos una breve descripción a continuación de aquellos que son los términos enlazantes que aparecen en los campos de fuerza.

### 2.4.1. Términos enlazantes

Los términos enlazantes incluyen contribuciones debidas a los enlaces covalentes, los ángulos de enlace y las torsiones propias e impropias [14].

- **Término de enlace covalente o stretching** Existen diferentes aproximaciones para representar el perfil de energía del enlace químico dependiendo del comportamiento armónico o enarmónico del mismo. Para casos donde el comportamiento del enlace sea del tipo enarmónico se suele recurrir a un potencial de Morse [15] o aproximaciones polinomiales [13, 16]. Normalmente, se estudian sistemas de comportamiento armónico donde las distancias de enlace están próximas al equilibrio y la distorsión de enlace se puede describir mediante el oscilador armónico de Hooke
- **Término de ángulo o bending** La vibración del ángulo entre tres átomos puede ser representado en su esquema más sencillo por un potencial armónico tipo Hooke, aunque cuando la distorsión respecto al equilibrio es mayor se recurre al uso de funciones más complejas [13, 16].
- **Términos de torsión** Presentan una periodicidad que hace necesario expresar sus perfiles energéticos como series de Fourier. Cuanto más complejo es el perfil de energía de la torsión, más términos se necesitarán para describirlo [13, 16]. En general, la mayoría de las energías torsionales se ajustan a una expansión de Fourier de orden tres. Este tipo de torsión recibe el nombre de torsión propia para diferenciarla de otro tipo especial de torsión; la torsión impropia que se utiliza para forzar a determinados átomos a mantenerse en el plano generado por otros tres. Este tipo de torsiones se aplican especialmente para reproducir adecuadamente las vibraciones de fuera del plano de átomos unidos a sistemas aromáticos.

### 2.4.2. Campos de Fuerza

En la actualidad existen varios tipos de campos de fuerzas los cuales han sido desarrollados para diferentes, como es el caso de la modelización de grandes moléculas, donde su principal característica es que simplifican las funciones del potencial por necesidades computacionales al tener que tratar con moléculas de gran tamaño. A pesar de esto han dado buenos resultados sobre todo para las propiedades termodinámicas o densidades. Existen parametrizaciones más complejas, en las cuales se pueden ubicar cargas en sitios diferentes de los átomos, o bien, se pueden modelar las interacciones electrostáticas mediante dipolos puntuales en lugar de cargas [17].

$$E(R) = \sum_{uniones} \frac{k_i}{2} (d_i - d_{i,0})^2 + \sum_{ángulos} \frac{k_i}{2} (\theta_i - \theta_{i,0})^2 + \sum_{torsiones} \frac{V_n}{2} (1 + \cos(n\omega - \lambda)) + E_{no-union} \quad (2.3)$$

donde

$$E_{no-union} = \sum_i \sum_j 4\epsilon_{ij} \left[ \frac{\sigma_{ij}^{12}}{r_{ij}^{12}} - \frac{\sigma_{ij}^6}{r_{ij}^6} \right] + \sum_i \sum_j \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \quad (2.4)$$

La ecuación 2.3 la cual representa la energía potencial del sistema, está compuesta por cuatro términos, donde: el primero describe las energías asociadas a estiramiento de enlaces covalentes, el segundo describe las energías asociadas al doblamiento de enlaces covalentes, el tercero está relacionado con movimientos torsionales y el cuarto se aplica a los átomos distantes, usualmente se describe mediante un potencial electrostático sumado a uno de Lennard-Jones [18, 13].

Para el caso de esta tesis solo mencionaremos el campo de fuerza OPLS y la específica variante utilizada en este trabajo.

## Optimized Potentials for Liquid Simulations (OPLS)

Para realizar las simulaciones de los sistemas de interés se utilizó el campo de fuerza "Optimized Potentials for Liquid Simulations" (OPLS), este campo de fuerza fue optimizado para tener la capacidad de adaptarse a las propiedades experimentales de los líquidos. OPLS es un conjunto de campos de fuerza desarrollado por el Prof. William L. Jorgensen [19].

En la forma general del potencial tenemos los términos de enlaces ( $E_{uniones}$ ), ángulos ( $E_{ángulos}$ ), diedros ( $E_{torsiones}$ ) y las interacciones no enlazantes ( $E_{no-union}$ ).

$$E(r^N) = E_{uniones} + E_{ángulos} + E_{torsiones} + E_{no-union} \quad (2.5)$$

donde

$$E_{uniones} = \sum_{uniones} k_r (r - r_0)^2 \quad (2.6)$$

$$E_{ángulos} = \sum_{ángulos} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 \quad (2.7)$$

$$E_{torsiones} = \sum_{torsiones} \left( \frac{V_1}{2} [1 + \cos(\phi - \phi_1)] + \frac{V_2}{2} [2\phi - \phi_2] + \frac{V_3}{2} [1 + \cos(3\phi - \phi_3)] + \frac{V_4}{2} [1 - \cos(4\phi - \phi_4)] \right) \quad (2.8)$$

$$E_{no-union} = \sum_{i>j} f_{ij} \left( \frac{A_{ij}}{(r_{ij})^2} - \frac{C_{ij}}{(r_{ij})^6} + \frac{q_i q_j e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right) \quad (2.9)$$

con la combinación de reglas para  $A_{ij} = \sqrt{A_{ii}A_{jj}}$  y  $C_{ij} = \sqrt{C_{ii}C_{jj}}$  Las interacciones intermoleculares no enlazantes ( $E_{no-union}$ ) se cuentan solo por átomos de tres o más enlaces aparte; 1,4 interacciones son reducidas por el "fudge factor" (a figure included in a calculation to account for error or unanticipated circumstances, or to ensure a desired result)  $f_{ij}=0.5$ , de otra manera  $f_{ij}=1.0$ . Todos los sitios de interacción están centrados en los átomos; no hay "pares solitarios".

Existe OPLS-ua (átomo unido), que incluye átomos de hidrógeno junto al carbono implícitamente en los parámetros de carbono, y se puede usar para ahorrar tiempo de simulación. Para este caso utilizamos específicamente OPLS-aa el cual incluye a todos los átomos explícitamente en la simulación [20].

## 2.5. Condiciones de Forntera-Periódica.

La capacidad tecnológica aún se encuentra muy lejos de poder reproducir sistemas reales (sistemas de partículas por mol), y debido a la importancia de los tamaños finitos que se consideran en SDM es necesario tener ciertas aproximaciones para obtener resultados en menores tiempos de simulación (que no sea necesario tener que construir sistemas con un gran número de partículas).

Una de estos requerimientos es considerar condiciones de frontera periódicas en la celda de simulación del sistema, esto consiste en reproducir la celda infinitamente en el espacio, entonces cuando los átomos de la simulación se mueven sus imágenes periódicas en las celdas vecinas lo hace, así si algún átomo sale de la celda original, una imagen de este entra por la cara opuesta, de esta manera la densidad de átomos se mantiene constante y se eliminan los efectos de superficie.

## 2.6. Topología y Algoritmo de SDM

La topología del sistema es un archivo el cual incluye una descripción del campo de fuerza, en el archivo tenemos la descripción de la ubicación de los átomos involucrados, las energías involucradas de enlace entre otros parámetros necesarios (información correspondiente a la molécula, como ángulos de enlace) para la simulación.

De manera general SDM funciona de la siguiente manera: (1) El programa lee los parámetros seleccionados por el usuario (condiciones, energías, número de pasos, información de las partículas, etc), (2) se realizará un ciclo el cual se repetirá hasta alcanzar el número de pasos seleccionado por el usuario (pasos del ciclo:a) calcular las fuerzas para cada partícula, b) integrar las ecuaciones de Newton, 3) guardar la información y repetir con los nuevos valores), y (3) calcular los promedios de las propiedades de interés.

## 2.7. Modelos de agua.

En SDM existen diferentes modelos de interacción que describen el comportamiento del agua. Dichos modelos se pueden clasificar debido a ciertas características como: (1) número de sitios (puntos interactuantes en una molécula), (2) si es rígido o flexible, y (3) si considera efectos de polarización explícitamente. En los modelos rígidos las distancias de enlace y ángulos se mantienen fijos. Debido a que el agua por si sola es todo un área de estudio, a lo largo del tiempo se han llegado a desarrollar diferentes modelos para el agua, en busca de aquel que reproduzca mejor el comportamiento de esta. Por efectos de esta tesis solamente se mencionara aquél con el que se estuvo trabajando con los sistemas.

Los modelos rígidos no polarizables se describen principalmente por interacciones Coulombicas más una interacción de Lennard Jones centrada en el oxígeno. Para un modelo no polarizable los efectos de inducción deben ser incluidos en las cargas asignadas a los sitios

[21]. Es necesario incluir una corrección de polarización en el potencial efectivo a pares para mejorar los parámetros en la región del espacio de parámetros. Debido a que el calor de vaporización es demasiado largo se producen errores en la parametrización. Esta corrección consiste en sumar a la energía del sistema una auto-energía que corresponde a la energía requerida para inducir los dipolos.

### 2.7.1. Modelo SPC

Es un modelo de agua, rígido no polarizable el cual utiliza potenciales pares. El modelo SPC por sus siglas en inglés, Simple Point Charge (carga puntual simple), consiste en un modelo tetraédrico del agua, con una distancia  $r_{OH}$  de  $1\text{\AA}$ , las cargas puntuales se encuentran en el oxígeno e hidrógeno,  $-0.82e$  y  $+0.41e$  respectivamente, y una interacción tipo Lennard-Jones en la posición del oxígeno. Su momento dipolar  $\mu$  es de  $2.27 D$  comparado con la molécula de agua aislada que tiene  $\mu = 1.85 D$  [?]. El modelo SPC fue ajustado para reproducir los valores de la densidad y el calor de vaporización a  $300 K$ . La energía potencial obtenida para el modelo SPC fue de  $41.7 \frac{kJ}{mol}$ , una densidad de  $0.98g * cm^{-3}$  y un coeficiente de difusión de  $3.6 * 10^5 * cm^2 * s^{-1}$ .

## 2.8. Cálculo de Propiedades.

La SDM permite calcular ciertas propiedades termodinámicas (con la información de salida de las posiciones, velocidades y energías), y los errores de los resultados provienen de la selección adecuada de parámetros y la selección del potencial para el tipo de sistema. Las propiedades que es posible calcular se pueden clasificar de forma global en cuatro categorías (únicamente se presentan algunos ejemplos de cada caso):

1. Propiedades estructurales estáticas:
  - Función de distribución radial (RDF)
2. Ecuaciones de estado:
  - Funciones de energía
  - Diagramas de estado
3. Transporte
  - Viscosidad
  - Conductividad
  - función de correlación temporal
  - Difusión
4. Respuestas fuera de equilibrio

- Patrones de deformación

Recordando lo que se ha abordado en secciones anteriores, se tienen el valor instantáneo de una propiedad la cual depende del espacio fase del sistema; debido a que el sistema evoluciona en el tiempo, el espacio fase evoluciona y por ende la propiedad también, entonces la propiedad física observable en el tiempo sería el promedio temporal de la propiedad observada (considerando un intervalo temporal largo).

## 2.8.1. Propiedades

A continuación se da una pequeña descripción de las propiedades a considerar en los sistemas de estudio.

- Energía Potencial.  
Cuando las fuerzas son calculadas la energía potencial de cada término es calculada también. La energía potencial es la suma de varias contribuciones tales como Lennard-Jones, Coulomb y términos de enlaces.
- Energía Cinética  
La Energía cinética del sistema viene determinada por la contribución de la energía cinética de cada partícula. A partir de la relación de física estadística, donde tenemos la energía cinética, la constante de boltzmann, los grados de libertad y la temperatura involucradas se calcula la temperatura absoluta en el sistema.
- Presión  
El tensor de presión es calculado a partir de la diferencia entre la energía cinética y el virial, donde el tensor virial esta definido por una relación entre la distancia entre las partículas y la fuerza. ( para ver mas ver manual GROMACS apendice A)
- Función de Distribución Radial (RDF)  
Es una función que está relacionada con la probabilidad de encontrar una segunda partícula a cierta distancia radial respecto a una partícula de referencia [22]. Es decir, describe la forma en que varía la densidad en función de la distancia a una partícula de referencia.  
La función de distribución radial entre partículas de tipo A y B está definida de la siguiente manera [gromacs]:

$$g_{AB}(r) = \frac{\langle \rho_B(r) \rangle}{\langle \rho_B \rangle_{local}}$$

$$g_{AB}(r) = \frac{1}{\langle \rho_B \rangle_{local}} \frac{1}{N_A} \sum_{i \in A}^N \sum_{j \in B}^N \frac{\delta(r_{ij} - r)}{4\pi r^2} \quad (2.10)$$

con la densidad de la partícula B  $\langle \rho_B(r) \rangle$  a la distancia  $r$  alrededor de la partícula A y el promedio de la densidad de la partícula B  $\langle \rho_B \rangle$  alrededor de las partículas A con un radio  $r_{max}$ . En SDM usualmente el valor de  $r_{max}$  es la mitad de la longitud de la caja de la simulación.

- Radio de Giro.

El radio de giro nos indica el tamaño promedio de un polímero en disolución, definido como  $R_g = \sqrt{\langle s^2 \rangle}$  en el caso de una molécula flexible, o simplemente  $R_g = s$  para una macromolécula rígida [23]. Es la propiedad conformacional conocida como radio de giro cuadrático medio,  $\langle s^2 \rangle$ , definida mediante la siguiente expresión [23]:

$$\langle s^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle s_i^2 \rangle \quad (2.11)$$

donde  $s_i^2$  es el módulo cuadrático del vector definido entre el centro de masas de la cadena y la posición ocupada por el fragmento  $i$  en una conformación instantánea. Los corchetes angulares  $\langle \dots \rangle$  indican el promedio sobre todas las conformaciones posibles que puede adoptar la estructura.

- Distancia cuadrática media de las fluctuaciones (RMSF)

Distancia cuadrática media de las fluctuaciones (RMSF), es una medida de la flexibilidad local de una estructura. El RMSF del átomo  $i$  da cuenta del grado de fluctuación de las coordenadas de dicho átomo respecto a su promedio temporal [23]:

$$RMSF(i) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \langle x_i \rangle)^2 + (y_i - \langle y_i \rangle)^2 + (z_i - \langle z_i \rangle)^2} \quad (2.12)$$

Donde los términos entre paréntesis oblicuos corresponden a los promedios temporales. Captura la fluctuación por átomo en torno a su posición media, esto da una idea de la flexibilidad de las regiones y por lo tanto podemos conocer la estabilidad estructural.

- Área superficial accesible al solvente (SASA)

El área superficial accesible (SASA) al solvente no se puede calcular de manera analítica, debido a que el solvente está compuesto por elementos discretos. Por ejemplo, se puede calcular la SASA numéricamente, utilizando un algoritmo que hace rodar una esfera de radio  $1,4\text{\AA}$  sobre la superficie molecular, el cual corresponde al radio de giro de la molécula de agua [24]. SASA nos proporciona una gráfica del área superficial que tiene contacto con el solvente a lo largo del tiempo

- Desviación de la distancia cuadrática media (RMSD)

Es un ajuste de mínimos cuadrados de la estructura tomando de referencia a otra estructura ( $t_2 = 0$ ) y consecuentemente calcular la *RMSD*

$$RMSD(t_1, t_2) = \left[ \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N m_i \|r_i(t_1) - r_i(t_2)\|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.13)$$

donde  $M = \sum_{i=1}^N m_i$  y  $r_i(t)$  es la posición del átomo  $i$  al tiempo  $t$  La RMSD cuantifica la distancia entre cada residuo después de una alineación entre dos estructuras, también puede hacer la comparación a lo largo de toda la trayectoria [25].

- Coeficiente de difusión

Se calcula el coeficiente de difusión a partir del desplazamiento cuadrático medio por medio de la relación de Einstein [26].

- Viscosidad

La viscosidad es una propiedad de los líquidos que se puede determinar fácilmente mediante un experimento. Es útil para parametrizar un campo de fuerza porque es una propiedad cinética, mientras que la mayoría de las otras propiedades que se usan para la parametrización son termodinámicas.

La viscosidad puede ser calculada de una simulación en equilibrio utilizando la relación de Einstein [26]. Este método converge muy lentamente [27, 28], y como tal la simulación de nanosegundos puede no ser lo suficientemente larga para una determinación precisa de la viscosidad. El resultado es muy dependiente del tratamiento de la electrostática.

Otra opción para el cálculo de la viscosidad con resultados más fiables es el uso de la función de correlación de la presión para estimar la viscosidad (método implementado también en GROMACS)

# Capítulo 3

## Antecedentes

En este capítulo se abordará la procedencia de los datos experimentales obtenidos previamente a este trabajo de los cuales corresponden las concentraciones en los sistemas y con los cuales nació la idea del trabajo mismo.

### 3.1. Datos- aceite de interes

Los datos experimentales se obtuvieron de la muestra de crudo 1004H de un pozo de Altamira. El análisis de la viscosidad entre otros fueron realizados por la Dr. Patsy Ramírez en el Laboratorio de Petroquímica del IPICYT. Los resultados del análisis PVT corresponden al análisis realizado en Schlumber, Ciudad del Carmen.

#### 3.1.1. Propiedades del Aceite

Esta muestra de petróleo contienen una alta concentración de  $H_2S$ , por lo cual es considerado de carácter peligroso.

Propiedad	Dato
Gravedad API 20°C	9.2
Densidad	1.004 g/cm <sup>3</sup>
pH	4.64
Porcentaje de agua en peso	15.0
Porcentaje de sedimentos en peso	20.0

Cuadro 3.1: Propiedades generales de la muestra del crudo a condiciones ambientales.

### 3.1.2. Calorimetría diferencial de barrido.

La calorimetría diferencia de barrido es una técnica termoanalítica en la que la diferencia del calor entre una muestra y una referencia es medida en función de la temperatura, lo cual proporciona información sobre el calor específico (CP, cantidad de calor requerida para elevar su temperatura en un grado) de la muestra. Para el petróleo el valor promedio de CP es de  $0.45 J/g^{\circ}C$ . Para el caso de la muestra de interés se reportó que el CP de la muestra aumenta dependiendo de la temperatura (sobre todo en los rangos de  $50 - 150^{\circ}C$ ). El CP promedio para esta muestra fue de  $1.5 J/g^{\circ}C$  a  $80^{\circ}C$ , el cual es superior al promedio general reportado para hidrocarburos, esto se le atribuye a la alta viscosidad del aceite.

### 3.1.3. Análisis PVT

Los resultados del análisis PVT corresponden al análisis realizado en Schlumber, Ciudad del Carmen.

- Propiedades de la muestra a condiciones de yacimiento

Propiedad	Dato
Densidad	$0.973 g/cm^3$
Viscosidad	2298 cP
Compresibilidad del aceite ( $C_o$ )	$4.97 \times 10^{-6}/psia$
Factor de volumen de formación ( $B_{of}$ ) <sup>2</sup>	1.041 vol/vol

Cuadro 3.2: Propiedades del aceite a condiciones de yacimiento.

- Propiedades de la muestra a condiciones de saturación

Propiedad	Dato
Densidad	$0.971 g/cm^3$
Viscosidad	2146 cP
Compresibilidad del aceite ( $C_o$ )	$5.05 \times 10^{-6}/psia$
Factor de volumen de formación ( $B_{of}$ ) <sup>3</sup>	1.043 vol/vol
Presión punto de burbuja	$13.25 kg/cm^2$

Cuadro 3.3: Propiedades de la muestra a condiciones de saturación.

### 3.1.4. Análisis Composicional

En la siguiente tabla se muestra el resultado del análisis composicional, este es de los datos más trascendentales para la planeación de los sistemas de estudio.

Componente	mole %
CO <sub>2</sub>	1.27
H <sub>2</sub> S	0.41
N <sub>2</sub>	0.02
C <sub>1</sub>	4.18
C <sub>2</sub>	0.98
C <sub>3</sub>	1.76
i-C <sub>4</sub>	0.60
n-C <sub>4</sub>	1.94
i-C <sub>5</sub>	0.82
n-C <sub>5</sub>	1.9
C <sub>6</sub>	2.10
C <sub>7</sub>	3.43
C <sub>8</sub>	4.09
C <sub>9</sub>	3.58
C <sub>10</sub>	3.45
C <sub>11</sub>	3.42
C <sub>12</sub>	3.46
C <sub>13</sub>	3.49
C <sub>14</sub>	3.17
C <sub>15</sub>	3.08
C <sub>16</sub>	2.96
C <sub>17</sub>	2.60
C <sub>18</sub>	2.23
C <sub>19</sub>	2.45
C <sub>20</sub>	2.04
C <sub>21</sub>	2.00
C <sub>22</sub>	1.90
C <sub>23</sub>	1.68
C <sub>24</sub>	1.57
C <sub>25</sub>	1.43
C <sub>26</sub>	1.39
C <sub>27</sub>	1.31
C <sub>28</sub>	1.33
C <sub>29</sub>	1.30
C <sub>30+</sub>	27.27
TOTAL	100.0

Cuadro 3.4: Análisis Composicional.

### **3.1.5. Viscosidad**

El petróleo crudo es una mezcla compleja, donde la proporción y tamaño de los mismos determina su comportamiento, se considera un fluido no newtoniano debido a que su viscosidad varía con la temperatura y la tensión cortante que se le aplica. La viscosidad de los aceites típicamente se mide con viscosímetros (utiliza funciones de Newton donde la viscosidad es producto del área superficial del líquido por gradiente de velocidad) como función de la temperatura y presión. Típicamente en esta clase de aceites al aumentar la temperatura disminuye su viscosidad así como su carácter no newtoniano.

La viscosidad de la muestra se midió en el Laboratorio de petroquímica del IPICYT con una celda Thermosel acoplada a un viscosímetro Bookfield modelo DV2T a presión atmosférica con un cambio de temperatura de 20 a 180°C.

Se reporta como la viscosidad del aceite puede disminuir hasta 4 órdenes de magnitud con una recta de temperatura hasta de 200°C, iniciando con una viscosidad aproximada de 100,000 cP y terminando con 50 cP, a pesar del cambio lineal en la temperatura (durante la medición) la viscosidad del aceite presenta un comportamiento asintótico.

#### **Resultados de viscosidad de las emulsiones**

Se realizaron pruebas de emulsiones con la muestra del crudo. Se realizaron mediciones para diferentes concentraciones de agua y aceite, diferentes rapidezces de agitación y también para diferentes temperaturas. Se reportaron los resultados de la viscosidad en función de la temperatura, las concentraciones de agua en la muestra fueron de 10% W/O%, 25% W/O, 50% W/O y 75% W/O. En los resultados se reporta que el comportamiento del crudo en presencia de agua no es lineal (no hay un cambio gradual reproducible de la viscosidad, ante la presencia de agua y temperatura para las diferentes muestras). Se observa que la viscosidad disminuye al aumento de la temperatura (algo que se había mencionado en la sección de viscosidad). Se reporta como a 20°C se observa como la presencia de agua, afecta en el aumento de la viscosidad en la muestra.

## **3.2. Antecedentes**

A lo largo del tiempo y debido a la necesidad y el cambio tecnológico y recursos científico, se han ido realizando investigaciones a diferentes escalas y a diferentes enfoques, sobre el petróleo. Desde la problemática de la ubicación del yacimiento, la correcta colocación del pozo, la extracción del crudo, transporte, refinación, utilización, mejora, etc, etc, hasta las problemáticas e impactos ambientales que todo esto conlleva. Por lo que se puede encontrar en la literatura un mar de información al respecto.

Debido al enfoque de la tesis, sólo se realizó una revisión superficial de algunos modelos utilizados en la literatura para tratar de reproducir alguna de las propiedades del crudo a me-soescala, ya en la siguiente sección nos enfocamos un poco sobre trabajados de simulación para el estudio de los hidrocarburos (para este caso ya solo estamos hablando del comporta-

miento a microescala).

Podemos ver como en la ciencia, cada día los modelos matemáticos se buscan pegar más a la realidad, para la reproducibilidad de las propiedades de este fluido (el crudo), continuamente se van mejorando u optimizando dichos modelos para la mejora y precisión de resultados (comparándolos con los datos reportados experimentalmente).

A mesoescala hay quienes afirman que el comportamiento reológico es la clave para la evaluación, simulación y adecuado entendimiento de los yacimientos petroleros, esto nos indica cómo el comportamiento total del yacimiento depende del comportamiento del fluido involucrado en este. Sergio E. Quiñones-Cisneros y colaboradores utilizan la teoría de fricción (de la cual se han desarrollado descripciones precisas para la viscosidad de cizalladura newtoniana de los fluidos), ellos trabajaron sobre la descripción de cizalladura de los crudos, lo cual logra reproducir la reología experimental newtoniana y no newtoniana en amplios rangos de temperatura de los aceites estudiados, reportan una desviación menor al 15 % [29].

Sin embargo dicho modelo para la explicación del comportamiento de la viscosidad de los crudos no es el único desarrollado hasta ahora, también tenemos el modelo de viscosidad de fluido expandido el cual es para fluidos newtonianos pero se extiende a los crudos, el grupo de Motahari desarrolló un método de estimación internamente consistente para predecir los parámetros específicos del fluido del modelo de hidrocarburos cuando no se dispone de datos de viscosidad experimentales dicho modelo está basado en el modelo de viscosidad de fluido expandido (EF), reportan que dicho modelo presenta una desviación relativa absoluta media general del 31 % [30].

La aplicabilidad del modelo EF también se demostró utilizando las densidades determinadas con la ecuación de estado de Peng-Robinson.

La tecnología y el desarrollo de las herramientas gráficas, también han generado el desarrollo de modelos a partir de los datos gráficos, Francisco J. Pacheco-Roman y colaboradores proponen técnica gráfica novedosa para calcular el coeficiente de difusión y la constante de Henry a partir de los datos experimentales de decaimiento de presión [31].

Recordemos que las condiciones del crudo y los componentes del mismo es lo que lo coloca en un fluido complejo, sumando a esta complejidad tenemos que en los yacimientos muchas veces tiene presencia de agua, sin olvidar que uno de los métodos actuales de extracción consiste en la inyección de vapor de agua en el yacimiento para aumentar la presión en el mismo y de esa manera facilitar la extracción del crudo. Entonces al hablar de que en algunos casos tenemos sistemas de aceite-agua, empezamos a ver otra clase de problemática con la formación de **emulsiones** (las emulsiones son un tipo de coloide metaestable compuesto por dos o más líquidos inmiscibles) en el sistema. Considerando que la formación de emulsiones genera un cambio en las propiedades del sistema (las emulsiones pueden presentar propiedades diferentes a las propiedades de los componentes independientes), también se ha realizado mucho trabajo sobre esta área del conocimiento, no solo debido a sistemas como el crudo, sino a la existencia de miles de sistemas los cuales es de gran relevancia la existencia de emulsiones. Solo para no dejar de lado este tema (también recordando que se hablara más sobre emulsiones en uno de los Anexos “Proyecto realizado en la Universidad de Calgary”). Juan Pablo Gallo-Molina utiliza una aproximación multiescala para el estudio de emulsiones de agua en aceite (W / O) , donde estableció las relaciones entre la energía incorporada, el módulo elástico, el diámetro medio de la gota y las medidas de estabilidad,

también se reportó el modelamiento con Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) con el cual permitió la observación de gradientes en viscosidad relativa, diámetro de gota y fracción de volumen de fase dispersa [32].

### 3.2.1. Simulaciones de dinámica molecular

Como se abordó en el capítulo de “Conceptos Generales simulaciones computacionales” (lo cual justo se vio en la sección anterior) existen varios métodos para el estudio a nivel molecular de los sistemas, en esta sección se enfocará en aquellos trabajos los cuales se han realizado para el caso de los hidrocarburos, en algunos casos se resuelve el sistema por el método de Monte Carlo (método numérico que permite resolver problemas físicos y matemáticos mediante la simulación de variables aleatorias.).

Utilizando simulaciones de Monte Carlo tenemos a: (1) Marcus G. Martin el cual estudió simulaciones isobáricas, isotérmicas y ensambles de Gibbs para calcular las densidades y la coexistencia vapor-líquido para una serie de moléculas orgánicas, evaluó los campos de fuerza AMBER, CHARMM; COMPASS; GROMOS, TraPPE-UA y UFF y OPLS-aa, previamente evaluadas por “First Industrial Fluid Properties Simulation Challenge dataset” los cuales reportaron un promedio del error cuadrático medio de  $0.004 \text{ g/ml}$ . Marcus G. Martin reporta que TraPPE es el mejor campo de fuerza para reproducir resultados de líquidos, seguido por CHARMM, el mejor para reproducir resultados de vapor de densidades fue AMBER seguido por CHARMM. AMBER, GROMOS y OPLS reprodujeron de manera similar las propiedades de los líquidos. El campo de fuerza UFF resultó muy pobre y poco adecuado para simulaciones de fases condensadas. Recomiendan que para estudios de fases líquidas se han utilizados los campos de fuerza CHARMM y TraPPE [33].

(2) Por su parte George Kaminski y William-L Jorgensen probaron el desempeño de los campos de fuerza AMBER94, MMFF94, OPLS-aa para el caso del butano, metanol y *n*-metilacetamida. Reportan un error menor el menor error al calcular las densidades y calores de vaporización con el campo de fuerza OPLS-aa (alrededor de 1.5%). Reportan que los campos de fuerza AMBER94 y OPLS-AA son adecuados para simulaciones de sistemas de fase condensada [34].

(3) George Kaminski y colaboradores utilizaron el campo de fuerza OPLS, estudiando líquidos puros como soluciones acuosas de metano, etano, propano y butano, reporta como OPLS no deja ambigüedad en términos de su rendimiento en entornos hidrofílicos o hidrofóbicos. Y reporta como **OPLS-aa tiene una superioridad general** (por ejemplo, las desviaciones promedio de las energías libres de hidratación medidas experimentalmente se redujeron de 0,36 a 0,13 kcal mol) [35].

Para el caso de simulaciones de dinámica molecular tenemos: (1) Robert B. Herman utilizando OPLS reporta las energías libres de solvatación de hidrocarburos en agua y las interacciones hidrofóbicas en el sistemas, utilizando datos de solubilidades experimentales y presiones parciales [36]. (2) Julien Collell y colaboradores estudiaron el transporte de mezclas de hidrocarburos a través de kerógeno, logrando calcular los coeficientes de transporte específicos de especie de Onsager de una mezcla rica en gas condensado, proponen una ley

de escala simple para predecir el coeficiente de transporte de alcanos lineales en la mezcla [37].

(3) Shirley W. I. Siu y colaboradores optimizan el campo de fuerza OPLS-AA para hidrocarburos cortos y largos. refinamos los parámetros de torsión para los hidrocarburos ajustando los perfiles de energía ab initio de la fase gaseosa La optimización de cargas parciales finalmente permitió reproducir la temperatura de transición de gel a fase líquida para pentadecano y energías libres de solvatación [38].

(4) S. Karaborni realizó simulaciones con un modelo simple de agua\aceite\surfactante para imitar la solubilización de moléculas no polares en soluciones acuosas de surfactante. Reporta como SDM tienen la capacidad de apreciar al auto organizamiento de las moléculas para formar los agregados micelares [39].

(5) Raymond D. Mountain y D. Thirumalai analizan el mecanismo de desnaturalización de la urea, observan como para el caso de hidrocarburos largos tiene la capacidad de adoptar múltiples configuraciones "doblado" y "desplegado" [40].

(6) GuozhongWu y colaboradores estudiaron la absorción, difusión y distribución a escala molecular de asfalteno, resina, fracciones aromáticas y saturadas de crudo pesado en la superficie de cuarzo. Este estudio sugirió la importancia de la temperatura en los cambios microestructurales de las fracciones de petróleo en la superficie, que fue el responsable último de la desorción [1].

Con esta revisión global, histórica y breve del avance de los modelos computacionales y los campos de fuerzas disponibles para el estudio de moléculas tales como hidrocarburos y de la versatilidad existente en las simulaciones de dinámica molecular, vemos cómo SMD tienen la capacidad de acelerar nuestros pasos hacia la comprensión del comportamiento del petróleo crudo, lo cual es crítico para el diseño de adecuados procedimientos (de diferente índole).

# Capítulo 4

## Metodología

En este capítulo se abarcará toda la información relacionada sobre los diferentes softwares utilizados para la construcción, estudio, ejecución y visualización de los sistemas a lo largo del trabajo. Se presentará primero una breve descripción de la funcionalidad y las bases del software, después cuáles fueron los parámetros en los cuales se estuvieron utilizando (para los diferentes casos) solo en caso de ser necesario especificar. Después se abarcará la metodología utilizada para los diferentes sistemas, desde la construcción hasta la evaluación para las moléculas hidrocarburo, y a su vez la metodología de los sistemas de mezclas de moléculas, también se podrá encontrar en el capítulo la información relacionada de los cálculos para la obtención del número de moléculas para los diferentes sistemas y las tablas donde se desglosa dicha información para los respectivos sistemas. Las especificaciones ciertos parámetros en el capítulo solamente se abordarán de manera global (rango) y en anexos podemos ver las tablas desglosando la información de los parámetros específicos utilizados para cada sistema.

### **4.1. Descripción del software y especificación de parámetros utilizados.**

En cuestión de los softwares utilizados, tenemos diferentes casos, para el caso de la construcción de los hidrocarburos y la primera optimización geométrica de la molécula se utilizó Avogadro, para la optimización de la geometría utilizando métodos ab initio se utilizó la plataforma de ATB (Automated Topology Builder), para la construcción y realización de la dinámica molecular junto con los análisis se utilizó GROMACS, y para la visualización tanto de las moléculas individuales como de los sistemas se utilizaron Pymol y VMD. Podemos encontrar la descripción de los softwares mencionados en la siguiente lista, se ubican en el mismo orden que arriba mencionado.

### 4.1.1. Descripción del software

#### ■ Avogadro

Avogadro es una herramienta gratuita de edición y editor molecular de código abierto, diseñada para su uso en Mac, Windows y Linux en química computacional, modelado molecular, bioinformática, ciencia de materiales y áreas relacionadas.

Para la construcción de las moléculas de interés (en este caso hidrocarburos lineales saturados) se utilizó el editor y visualizador de moléculas ‘‘avogadro’’ el cual fue diseñado para el uso multiplataforma en química computacional, modelado molecular, bioinformática, ciencia de materiales y áreas relacionadas. Éste ofrece una representación flexible de alta calidad y una potente arquitectura de complementos.

#### ■ Automated Topology Builder ‘‘ATB’’

El ATB y el repositorio están destinados a facilitar el desarrollo de campos de fuerzas moleculares para simulaciones de Dinámica Molecular o Monte Carlo de sistemas biomoleculares.

El generador de topología automatizada (ATB) y el repositorio se han desarrollado y se mantienen actualmente con el apoyo de la Universidad de Queensland (UQ), el Australian Research Council (ARC) y la Queensland Cyber Infrastructure Foundation (QCIF). El acceso al ATB se proporciona de forma gratuita a usuarios académicos de instituciones de enseñanza o investigación financiadas públicamente. El acceso para uso académico está condicionado a: i) cualquier molécula sometida al ATB que esté disponible públicamente y ii) la fuente de cualquier material descargado del ATB sea debidamente reconocida en publicaciones u otras formas en que se difunde la investigación que utiliza este material.

Las aplicaciones incluyen: (1) el estudio de biomoléculas: complejos de ligandos, (2) cálculos de energía libre, (3) diseño de fármacos basado en estructura y (4) el refinamiento de complejos de cristales de rayos X. Este sitio proporciona: (1) Un repositorio de bloques de construcción y archivos de parámetros de interacción para moléculas descritas usando campos de fuerza de GROMOS, (2) un generador automático para ayudar a generar bloques de moléculas nuevas, compatibles con el campo de fuerzas GROMOS 54A7 y en formatos apropiados para los paquetes de simulación GROMACS, GROMOS y LAMMPS y CNS, Phenix, CCP4 y refinamiento de rayos X Refmac5, (3) un convertidor de archivos de topología del sistema para generar topologías AMBER de topologías GROMOS, (4) geometrías refinadas para moléculas dentro del repositorio y (5) coordenadas de partida equilibradas para una gama de sistemas biológicamente importantes.

#### ■ GRONingen MACHine for Chemical Simulation ‘‘GROMACS’’

GROMACS (GRONingen MACHine for Chemical Simulation) es un paquetería de licencia abierta para realizar simulaciones en escala atómica, desarrollado inicialmente por investigadores de Suecia y Alemani por el grupo de Departamento de Química de la Universidad de Groningen. Orientado para realizar simulaciones de Dinámica Molecular. GROMACS es de dominio público y se distribuye (con código fuente y documentación) bajo la Licencia Pública General de GNU.

Una de las ventajas que presenta es que su algoritmo que hace que el cálculo sea más

rápido para interacciones no enlazantes ( que usualmente son las que dominan el cálculo de esta clase de simulaciones), otra ventaja que presenta es la facilidad de uso y es más rápido debido a las optimización que utiliza (GROMACS, 2013) .

GROMACS usa condiciones de frontera periódicas, combinadas con la imagen convencional mínima de la imagen (solo una imagen, la más cercana, de cada partícula se considera para interacción no ligada de corto alcance). Para interacciones electrostáticas de largo alcance no siempre tiene precisión suficiente por lo que GROMACS utiliza la electrostática de Separación de Partículas de Ewald (PME)[?], .La simulación de la caja (celda unidad) es definida por tres vectores, los cuales deben de satisfacer específicas condiciones[?]. GROMACS cuenta con el programa "trjconv" el cual puede ser usado para convertir la trayectoria a diferentes representaciones de la celda unidad. También es posible simular sin condiciones periódicas, pero usualmente es más eficiente simular un cluster aislado de moléculas en una caja con condiciones periódicas. Para MD se introducen aparte otros algoritmos (dependiendo de las condiciones en las que se quiera simular el sistema y la calidad de resultados que se busca), hay algoritmos que se utilizan debido a que el intercambio de energía entre diferentes componentes no son perfectos (debido a los diferentes efectos incluidos en el sistema como el cut-off)

- **Pymol**

Es es un visor molecular de código abierto y auspiciado por usuarios creado por Warren Lyford Delano y comercializado por Delano Scientific LLC, una compañía dedicada a la creación de herramientas accesibles universalmente para las comunidades científicas y educacionales. PyMOL es apropiado para producir imágenes 3D de alta calidad de moléculas pequeñas y de macromoléculas biológicas, como las proteínas.

- **Visual Molecular Dynamics "VMD"**

Es un programa de modelamiento molecular y visualización de estructuras. VMD fue principalmente desarrollado como una herramienta para ver y analizar los resultados de las simulaciones de dinámica molecular, pero también incluye herramientas para trabajar con datos de volumen, secuencias y objetos gráficos arbitrarios como conos, cilindros o esferas.

#### **4.1.2. Especificación de parámetros utilizados.**

En esta sección se hablará de las especificaciones o la elección de los parámetros utilizados en el momento de utilizar el software, en caso de existir alguna especificación al respecto, debido que hay software que trabajan por default o no es necesario especificar algún dato.

- **Avogadro**

Para el caso de la optimización de la geometría realizada, se utilizó los parámetros preestablecidos por default por el software en la elección de campos de fuerza, únicamente se cambió el número de pasos para alcanzar esta optimización.

Se utilizó el campo de fuerza MMFF94 el cual es particularmente bueno con compuestos orgánicos. MMFF94 se ha parametrizado específicamente para alcanos, alquenos, alcoholes, fenoles, éteres, aldehídos, cetonas, cetales, acetales, hemicetales, hemiacete-

tales, aminas, amidas, análogos de péptidos, ureas, imidas, ácidos carboxílicos, ésteres, aniones carboxilatos, cationes de amonio, tioles, mercaptanos, disulfuros, halogenuros (cloruros y fluoruros), iminas, cationes de iminio, amina N-óxidos, hidroxilaminas, ácidos hidroxámicos, amidinas, guanidinas, cationes de amonio, cationes de guanidinio, cationes de imidazolio, hidrocarburos aromáticos y compuestos heteroaromáticos.

#### ■ **Automated Topology Builder ‘ATB’**

Para la optimización de las geometrías de las moléculas de cada hidrocarburo se utilizó la plataforma “Automated Topology Builder” (ATB) la cual utiliza el método mecano-cuántico DFT Hessian QM, con el potencial B3LYP y la base 6-31G\*. Proporciona una topología con energía minimizada para la molécula junto con el archivo de la geometría optimizada (con las nuevas coordenadas). Dichos archivos los genera automáticamente para el caso del campo de fuerza GROMOS54A7.

#### ■ **GROMACS**

Para este proyecto se utilizará la paquetería GROMACS (GRONingen MACHine for Chemical Simulations), el cual es un programa de alto rendimiento, de código abierto, multiplataforma utilizado para realizar la simulación de la dinámica molecular de sistemas con cientos de millones de partículas.

El modelo de agua seleccionado fue el modelo SPC. Se utilizó el campo de fuerza OLPS-aa en vista de su generalidad y su cuidadosa parametrización. seleccionando la electrostática de Separación de Partículas de Ewald (PME).

Como se abordó en el “Capítulo de Conceptos generales de simulaciones...”, para lograr el adecuado estudio de un sistema y llevarlo a las condiciones deseadas (temperatura y presión) hay que realizar una serie de pasos antes para llevarlo a un estado de equilibrio (mínima energía) antes de poder realizar la corrida de producción (la cual es la que se somete a los análisis dinámicos y estructurales). Entonces a continuación señalamos los parámetros utilizados para los diferentes casos para todos los sistemas:

##### 1. Minimización del sistema (ME)

Este paso se realiza para que las moléculas primero se acomoden en la celda unitaria debido a las interacción de largo alcance, en este paso no se generan trayectorias debido al cambio de las posiciones, únicamente se permite que el sistema se acomode, debido a que al agregar las moléculas de la caja de efectúa de manera azarosa (con un paquete que también cuenta gromacs).

A continuación se presenta el input (archivo mdp con las opciones de los parámetros a tener en cuenta por los algoritmos de DM):

```
; minim.mdp - used as input into grompp to generate em.tpr
; Parameters describing what to do, when to stop and what to save
integrator = steep ; Algorithm (steep = steepest descent minimization)
emtol = 1000.0 ; Stop minimization when the maximum force <1000.0 kJ/mol/nm
emstep = 0.01 ; Energy step size
nsteps = 50000 ; Maximum number of (minimization) steps to perform
; Parameters describing how to find the neighbors of each atom and how to calculate the interactions
nstlist = 10 ; Frequency to update the neighbor list and long range forces
ns.type = grid ; Method to determine neighbor list (simple, grid)
rlist = 1.0 ; Cut-off for making neighbor list (short range forces)
coulombtype = PME ; Treatment of long range electrostatic interactions
rcoulomb = 1.0 ; Short-range electrostatic cut-off
rvdw = 1.0 ; Short-range Van der Waals cut-off
pbc = xyz ; Periodic Boundary Conditions (yes/no)
cutoff-scheme = Verlet
```

Para todos los casos se utilizó los mismos parámetros para la minimización de energía. EM se aseguró de que tengamos una estructura de partida razonable, en términos de geometría y orientación de solventes.

## 2. Equilibración del sistema.

Para comenzar dinámicas reales, debemos equilibrar el solvente y los iones. Si intentamos una dinámica desenfadada en este punto, el sistema podría colapsar. La razón es que el solvente está optimizado en su mayoría en sí mismo, y no necesariamente con el soluto. Necesita ser llevado a la temperatura que deseamos simular y establecer la orientación adecuada sobre el soluto. Después de llegar a la temperatura correcta (en función de las energías cinéticas), aplicaremos presión al sistema hasta que alcance la densidad adecuada.

En nuestras simulaciones siempre utilizamos tres pasos para la equilibración del sistema antes de pasar a la corrida de producción, a cada paso se le dio el suficiente tiempo o se utilizó los parámetros adecuados para la energía de corte para alcanzar una correcta equilibración del sistema y que se pudiera generar una corrida de producción sin que el sistema colapse.

```
title = NPT cpp = \usr\bin\cpp
define = -DFLEXIBLE
integrator = md dt = 0.001 ; ps !
nsteps = 3000000
; Output control
nstxout = 1000
nstvout = 1000
nstfout = 1000
nstlog = 1000
nstenergy = 1000
nstxtcout = 1000
ns.type = grid
rlist = 1.5 ; short-range neighborlist cutoff (in nm)
coulombtype = PME ; Particle Mesh Ewald for long-range electrostatics
rcoulomb = 1.5 ; short-range electrostatic cutoff (in nm)
fourierspacing = 0.2 ; grid spacing for FFT
pme_order = 4 ; cubic interpolation
ewald_rtol = 1e-6
optimize_fft = no
vdwtype = Cut-off
rvdw = 1.5 ; short-range van der Waals cutoff (in nm)
;parametros agregados
cutoff-scheme = Verlet
table-extension = 100
; Bond parameters
continuation = yes ; Restarting after NVT
constraint.algorithm = lincs
constraints = all-bonds ; all bonds (even heavy atom-H bonds) constrained
lincs.iter = 1 ; accuracy of LINC6
lincs.order = 4 ; also related to accuracy
; temperature coupling
tcoupl = V-rescale ;berendsen ;Nose-Hoover
tau.t = 0.1
tc-grps = system
ref.t = 328.15; 25°C ; reference temperature, one for each group, in K
; Pressure coupling
pcoupl = Berendsen ; Pressure coupling on in NPT
tau.p = 1.0 ; time constant, in ps
pcoupltype = isotropic ; uniform
compressibility = 4.5e-5 ; isothermal compressibility, bar-1
ref.p = 34.4738 ; latm
refcoord.scaling = all
; Periodic boundary conditions
pbcs = xyz ; 3-D PBC
; Dispersion correction
DispCorr = EnerPres ; account for cut-off vdW scheme
; Velocity generation
gen.vel = no ; Velocity generation is off
```

La equilibración a menudo se lleva a cabo en dos fases. La primera fase se realiza bajo un conjunto NVT (Número constante de partículas, volumen y temperatu-

ra). Este conjunto también se conoce como "isotermo-isocórico.º canónico". El tiempo para tal procedimiento depende del contenido del sistema, pero en NVT, la temperatura del sistema debe alcanzar una meseta en el valor deseado. Si la temperatura aún no se ha estabilizado, se necesitará tiempo adicional.

En el siguiente cuadro vemos un ejemplo de uno de los input utilizados para el paso de NPT. La NPT es para compensación de presión se realiza bajo un conjunto de NPT, donde el número de partículas, la presión y la temperatura son constantes. El conjunto también se conoce como el conjunto "isotérmico-isobárico", y se asemeja más a las condiciones experimentales. Algunos sistemas tienen en su equilibración dos pasos NPT con diferentes presiones y tiempos, esto era dependiendo de que se necesitaba para acelerar un poco la compactación de la celda unitaria y equilibración de la misma.

También los sistemas en uno de sus pasos tuvieron las condiciones de NVT, el propósito de este paso en la simulación es borrar la memoria termodinámica del sistema, esto se realiza utilizando una rampa de temperatura. En el siguiente cuadro se muestra uno de los input para establecer los parámetros para NVT.

```
title = NVT
cpp = \usr\bin\cpp
define = -DFLEXIBLE
constraints = all-bonds ;cambiado de none
integrator = md
dt = 0.001 ; ps !
nsteps = 800000
; Output control
nstxout = 1000
nstvout = 1000
nstfout = 1000
nstlog = 1000
nstenergy = 1000
nstxtcout = 1000
;cambiando parametros
cutoff-scheme =Verlet
nstcalclr = 1 ; agragado Calculate the long-range forces every single step.
ns.type = grid
rlist = 1.7
coulombtype = PME
rcoulomb = 1.7
fourierspacing = 0.16
pme_order = 4
ewald_rtol = 1e-6
optimize_fft = no
vdwtype = Cut-off
rvdw = 1.7
; temperature coupling
Tcoupl = V-rescale ;berendsen ;Nose-Hoover
tau_t = 0.1
tc-grps = system
ref_t = 600
; Pressure coupling is off
pcoupl = no ; no pressure coupling in NVT
; Generate velocities
gen_vel = yes
gen_temp = 2000
gen_seed = 173529
;Simulated annealing
annealing = single
annealing_npoints = 8
annealing_time = 0 100 101 200 201 300 301 800
annealing_temp = 600 600 400 400 328.15 328.15 328.15 328.15
; Periodic boundary conditions
pbc = xyz ; 3-D PBC
; Dispersion correction
DispCorr = EnerPres ; account for cut-off vdW scheme
```

### 3. Producción

Una vez completadas las fases de equilibrio, el sistema está ahora bien equilibra-

do a la temperatura y presión deseadas. . Ahora estamos listos para liberar las restricciones de posición y ejecutar MD de producción para la recopilación de datos. El proceso es tal como lo hemos visto antes, ya que utilizaremos el archivo de punto de control (que en este caso ahora contiene información de preservar la presión de acoplamiento) a grompp. En el siguiente cuadro podemos ver el script de un input para la corrida de producción:

```

title = MD simulation
; Run parameters
integrator = md ; leap-frog integrator
nsteps = 1000000 ; 1 * 500000 = 500 ps (.5 ns)
dt = 0.001 ; 2 fs
; Output control
nstxout = 1000 ; save coordinates every 2.0 ps
nstvout = 1000 ; save velocities every 2.0 ps
nstenergy = 1000 ; save energies every 2.0 ps
nstlog = 1000 ; update log file every 2.0 ps
nstxout-compressed = 1000 ; save compressed coordinates every 2.0 ps
compressed-x-grps = System ; replaces xtc-grps
; Bond parameters
continuation = yes ; Restarting after NPT
constraint_algorithm = lincs ; holonomic constraints
constraints = all-bonds ; No constraints except for those defined
explicitly in the topology
lincs.iter = 1 ; accuracy of LINCS
lincs.order = 4 ; also related to accuracy
; Neighborsearching
cutoff-scheme = Verlet
ns_type = grid ; search neighboring grid cells
nstlist = 1;10 ; 20 fs, largely irrelevant with Verlet scheme
rcoulomb = 1.25 ; short-range electrostatic cutoff (in nm)
rvdw = 1.25 ; short-range van der Waals cutoff (in nm)
table-extension = 100
; Electrostatics
coulombtype = PME ; Particle Mesh Ewald for long-range electrostatics
pme.order = 8 ; cubic interpolation
fourierspacing = 0.16 ; grid spacing for FFT
; Temperature coupling is on
tcoupl = V-rescale
;nstcomm =1
tc-grps = System ; two coupling groups - more accurate
tau_t = 0.1 ; time constant, in ps
ref_t = 328.15 ; 25°C reference temperature, one for each group, in K
; Pressure coupling is on
pcoupl = no; Parrinello-Rahman ; Pressure coupling on in NPT
; Periodic boundary conditions
pbc = xyz ; 3-D PBC
; Dispersion correction
DispCorr = EnerPres ; account for cut-off vdW scheme
; Velocity generation
gen_vel = no ; Velocity generation is off
refcoord-scaling = no

```

- **Pymol**  
No es necesario especificar, se usaron los parámetros por default únicamente como herramienta de visualización.
- **Visual Molecular Dynamics “VMD”**  
Este programa para la visualización de los sistemas (de forma dinámica y estática), se utilizaron los parámetros por default únicamente como herramienta de visualización.

## 4.2. Número/tipo de moléculas de los sistemas.

Los sistemas estudiados a lo largo de la tesis fueron: (1) construcción y evaluación de las moléculas de forma individual, (2) sistemas con un solo tipo de hidrocarburo (se usaron 100

moléculas en la celda unidad), (3) sistemas de mezclas de hidrocarburos y (4) sistemas de las mezclas de hidrocarburos con diferentes porcentajes de fracción molar de agua.

Las moléculas utilizadas a lo largo de la tesis se muestran en la Tabla 4.1

Cuadro 4.1: Moléculas utilizadas en los sistemas.

$CO_2$	$H_2S$	$CH_4$	$C_2H_6$	$C_3H_8$
$i-C_4H_{10}$	$i-C_5H_{12}$	$C_6H_{14}$	$C_7H_{16}$	$C_8H_{18}$
$C_9H_{20}$	$C_{10}H_{22}$	$C_{11}H_{24}$	$C_{12}H_{26}$	$C_{13}H_{28}$
$C_{14}H_{30}$	$C_{15}H_{32}$	$C_{16}H_{34}$	$C_{17}H_{36}$	$C_{18}H_{38}$
$C_{19}H_{40}$	$C_{20}H_{42}$	$C_{21}H_{44}$	$C_{22}H_{46}$	$C_{23}H_{48}$
$C_{24}H_{50}$	$C_{25}H_{52}$	$C_{26}H_{54}$	$C_{27}H_{56}$	$C_{28}H_{58}$
$C_{29}H_{60}$	$C_{30}H_{62}$	$n-C_4H_{10}$	$n-C_5H_{12}$	

El tipo de moléculas a tener en cuenta, tanto la concentración de las mismas, fue considerada a partir de la fracción molar presente en el análisis composicional (revisado en el capítulo de antecedentes). La principal característica de los hidrocarburos involucrados en el estudio es que solo se consideraron hidrocarburos lineales y saturados.

Entonces de acuerdo al análisis composicional realizado al aceite se conocía el porcentaje molar de los hidrocarburos en el crudo. Debido a que estamos tratando con un sistema complejo debido al gran número de componentes involucrados y a los diferentes tamaños de los pesos moleculares de los mismos, ya que estamos tratando con un gran número de moléculas y a su vez con un gran número de átomos debido al tamaño de las moléculas involucradas, esto exige mucha capacidad de cómputo, por lo que se decidió estratificar el sistema de acuerdo a sus pesos moleculares.

La estratificación del sistema real (crudo), fue de acuerdo a sus pesos moleculares, lo cual nos derivó en 4 sistemas: (1) gases (los cuales contienen ácido sulfúrico, dióxido de carbono, y los hidrocarburos livianos de 1 carbono hasta 4 carbonos), (2) hidrocarburos semi-livianos (los cuales van de las moléculas con 5 carbonos hasta 10 carbonos), (3) hidrocarburos semi-pesados (de 11 carbonos hasta 20 carbonos) y (5) hidrocarburos pesados (de 21 carbonos hasta 30 carbonos). En la tabla 4.2 se presentan el tipo de moléculas y en número de las mismas utilizadas para cada sistema. El crudo del cual se obtuvieron los datos experimentales en condiciones de yacimiento presenta altas concentraciones de agua, por lo que uno de los intereses a abordar en la tesis es ver el comportamiento de las moléculas de hidrocarburo frente a la presencia de agua, por lo que tomando como base los sistemas planteados (Tabla 4.2), se calculó el número de moléculas de agua requeridas para obtener porcentajes específicos de fracción molar para cada sistema. En la Tabla 4.3 tenemos el número de moléculas de agua insertadas en la celda unidad para cada sistema para los respectivos porcentajes de fracción molar de interés.

Cuadro 4.2: Estratificación del crudo en 4 sistemas, en la tabla se presenta el sistema, el tipo de moléculas y el número utilizado.

Sistema	Molécula	Número de moléculas usadas
gas	$CO_2$	127
	$H_2S$	41
	$CH_4$	418
	$C_2H_6$	98
	$C_3H_8$	176
	i- $C_4H_{10}$	60
	n- $C_4H_{10}$	194
hidrocarburos livianos	i- $C_5H_{12}$	82
	n- $C_5H_{12}$	129
	$C_6H_{14}$	210
	$C_7H_{16}$	343
	$C_8H_{18}$	409
	$C_9H_{20}$	358
	$C_{10}H_{22}$	345
hidrocarburos semi-pesados	$C_{11}H_{24}$	342
	$C_{12}H_{26}$	346
	$C_{13}H_{28}$	349
	$C_{14}H_{30}$	317
	$C_{15}H_{32}$	308
	$C_{16}H_{34}$	296
	$C_{17}H_{36}$	260
	$C_{18}H_{38}$	223
	$C_{19}H_{40}$	245
	$C_{20}H_{42}$	204
hidrocarburos pesados	$C_{21}H_{44}$	37
	$C_{22}H_{46}$	35
	$C_{23}H_{48}$	31
	$C_{24}H_{50}$	29
	$C_{25}H_{52}$	26
	$C_{26}H_{54}$	25
	$C_{27}H_{56}$	24
	$C_{28}H_{58}$	24
	$C_{39}H_{60}$	24
	$C_{30}H_{62}$	500

Cuadro 4.3: Moléculas de agua utilizadas por sistema de acuerdo a su porcentaje de fracción molar

Sistema	% F.M.	Número de moléculas de agua
gas	25	371
	50	1114
	75	3342
hidrocarburos livianos	25	625
	50	1876
	75	5628
hidrocarburos semi-pesados	25	963
	50	2890
	75	8670
hidrocarburos pesados	25	252
	50	755
	75	2265

### 4.3. Moléculas de hidrocarburos

En esta sección se aborda la metodología general para la construcción y la evaluación de las moléculas de hidrocarburos.

#### 4.3.1. Metodología (esquema desde la construcción hasta la corrida de producción)

Los campos de fuerzas que están implementados en GROMACS ya cuentan con la información de los enlaces de carbono e hidrógeno. Por lo que si uno hace una correcta elección de campo de fuerza y archivos de entrada puede ahorrarse implementar los parámetros de las moléculas directamente en la información de campo de fuerza en GROMACS.

El diagrama de flujo de la metodología seguida para la construcción y la evaluación de las moléculas se encuentra en la Figura 4.1. La metodología realizada consta principalmente de tres secciones, la primera sección tiene que ver con la construcción de la molécula, la optimización de la geometría y la construcción de los archivos de entrada los cuales son los que se utilizan tanto para la evaluación de la funcionalidad de los datos de la molécula como para la construcción de los archivos de los sistemas. La segunda sección de la metodología tiene que ver con la ejecución de la dinámica molecular por ciertos tiempos y a parámetros específicos para generar los archivos de las posiciones y energías de los átomos, la tercera sección es ya el procesamiento de los datos que fueron los archivos de salida del paso anterior, en esta se realizan los análisis de los datos de salida.

Se realizó todo el proceso para todos los hidrocarburos usados en la tesis; para el caso del dióxido de carbono y ácido sulfúrico se realizó únicamente la sección para la optimización de la geometría y construcción de los archivos de entrada.

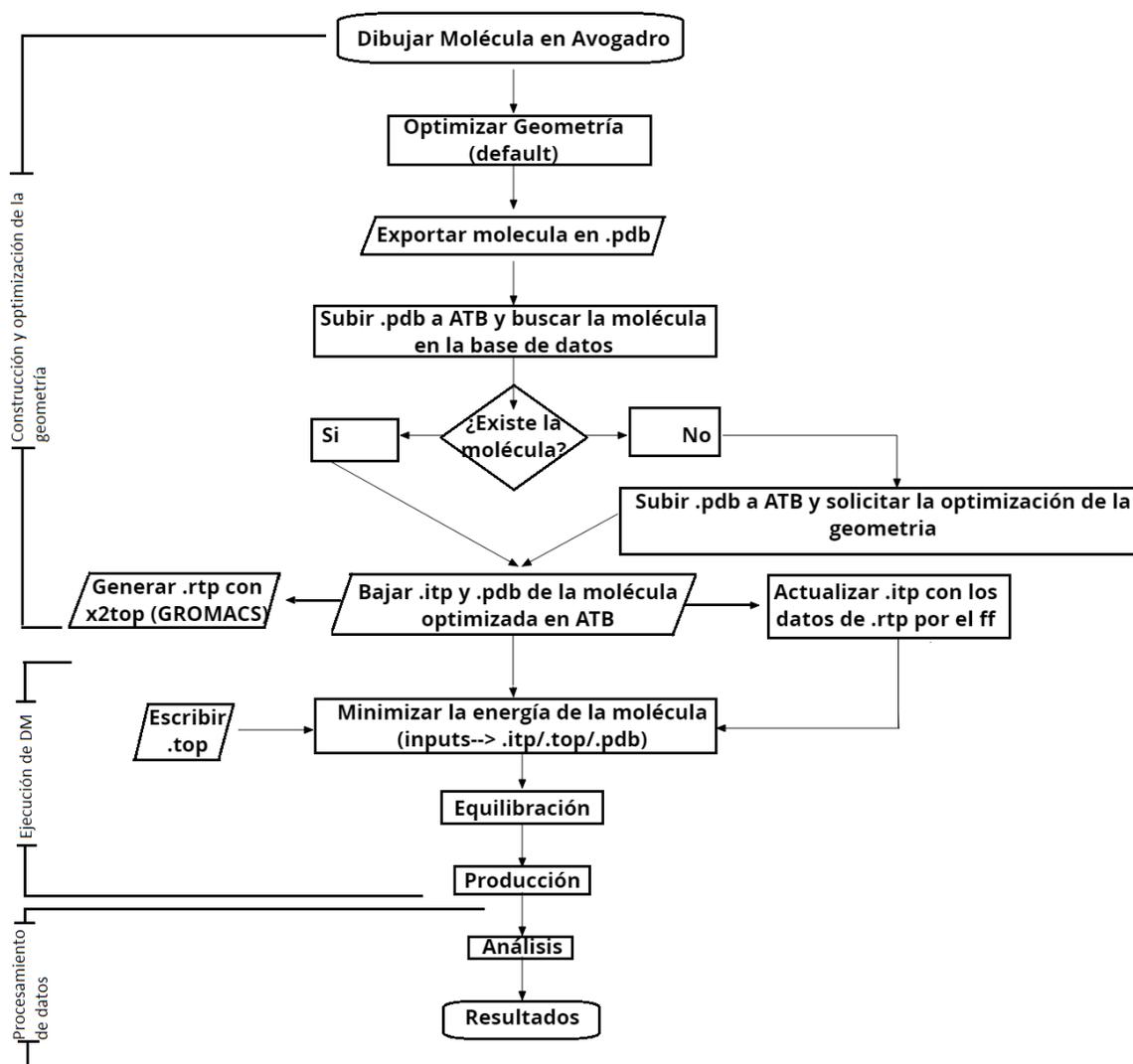


Figura 4.1: Diagrama de flujo del proceso para la evaluación de las moléculas de hidrocarburos

Para tener más clarificado el proceso a continuación se mencionan los pasos a seguir en la metodología, junto con algunas especificaciones:

1. Construcción de la molécula  
Se optimizó la geometría de la molécula del hidrocarburo primeramente el Avogadro con el campo de fuerza MMF94, 1000 pasos hasta una convergencia de la diferencia de energía menor a  $10e-7$ , considerando a la molécula aislada en el espacio, el algoritmo utilizado en avogadro fue Steetpest Descent, el cual es el pre elegido por avogadro. Se exporta la información de la molécula (tipo de átomos, posiciones, etc) en el formato pdb (Protein Data Bank).
2. Optimización de la geometría

Se sube el archivo .pdb a la plataforma de ATB, y se hace la búsqueda en la base de datos, para ver si ya se generaron los archivos para dicha molécula en la plataforma.

Si ATB cuenta ya con la información de la molécula, se puede acceder a la información contenida de la misma en la plataforma, en esta se puede encontrar la geometría optimizada de la molécula para el campo de fuerza GROMOS54a7, se procede a descargar el archivo itp (include topology; el cual contiene la información de las energías y enlaces con los nombres correspondientes para el campo de fuerza GROMOS54a7) y del pdb (el cual contiene las nuevas posiciones de los átomos de la molécula).

Si ATB no cuenta con la información de la molécula, es necesario crear la página de esta molécula en la plataforma, llenar algunos parámetros, como la carga de la molécula, el archivo pdb, nombre, entre otras cosas, ya que uno ha completado la información puede proceder a solicitar a la plataforma la optimización de la geometría con los métodos de DFT. Esta solicitud se va a sumar a una lista de espera y se va a realizar por pasos, cuando este la optimización final llega la notificación al correo, este proceso puede durar de 3 a 7 días.

### 3. Construcción de los archivos de entrada.

Hasta ahora contamos con los archivos .itp y .pdb de la molécula pero con las especificaciones del campo de fuerza GROMOS54a7. Por lo que hay que escribir los archivos para el campo de fuerza OPLS-aa. Para esto nos auxiliamos del paquete x2top de GROMACS, en cual nos ayuda a escribir un archivo .rtp (residue topology ) a partir de un .pdb, con ayuda de este archivo podemos reescribir el archivo .itp reconociendo cuales son los nombres de los residuos en el campo de fuerza OPLS-aa.

Se prepara el archivo .top (system topology ), donde se especifica el campo de fuerza que queremos que se use al ejecutar "grompp", que utilice el archivo .itp para obtener la información de la topología y contiene la información del sistema (como el tipo y número de moléculas presentes).

### 4. Minimizar la energía

Con los archivos de entrada .pdb, .itp y .top se puede proceder a ejecutar "grompp" de GROMACS. Primero se minimiza la energía de la molécula.

Integrador utilizado fue "steep", nsteps (número de pasos) fueron 50000, con un emtol de  $1000 \text{ KJ/mol/nm}$ , entonces la minimización se detiene cuando alcanza ese número de pasos o cuando la fuerza máxima es menor a  $1000 \text{ KJ/mol/nm}$ . El resto de las especificaciones se mencionó en la sección "Especificación de parámetros utilizados". Los archivos de salida de interés son .edr (energies, temperature, pressure, box size, density and virials), .gro (x and v), .xtc (x only (compressed, portable, any precision)), .tpr (system topology, parameters, coordinates and velocities).

### 5. Equilibración

Se utilizan los archivos de salida del paso anterior (.gro, .top, .cpt).

La equilibración se realizó en dos pasos NVT y NPT. Primero se realizó la NPT con 100000 nsteps, 0.001 dt, rlist entre 1.5, fourspaceing de 0.2, pcoupl Berendsen. Segundo de una NVT con 300000 nsteps, 0.001 dt, rlist 1.5, fourspaceing de 0.16 con una delta de temperatura de 200 K y una rampa de 600 a 298 K.

NPT utiliza los archivos de salida de la minimización, y NVT utiliza los archivos de

salida de NVT.

El resto de las especificaciones se mencionó en la sección ‘‘Especificación de parámetros utilizados’’. Para ambos casos se generan los archivos de salida: .tpr, .cpt,.edr, .gro, .log, .trr, .xtc.

## 6. Producción

Se utilizan los archivos de salida del paso anterior (.gro, .top, .cpt).

La corrida de producción fue con 500000 nsteps y 0.002 dt, rlist de aprox 1.5, fourspacing 0.2, ref\_t de 298.15 K, sin acoplamiento de presión. El resto de las especificaciones se mencionó en la sección ‘‘Especificación de parámetros utilizados’’.

Se generan los archivos de salida: .tpr, .cpt,.edr, .gro, .log, .trr, .xtc.

## 7. Análisis

Para este paso se utilizan los archivos de salida del paso anterior, dependiendo del tipo de análisis y la propiedad a analizar es el archivo el cual se va a utilizar, generalmente se selecciona como salida de dicha información archivos en formatos xvg, los cuales son las tablas de datos generalmente propiedad vs tiempo, o propiedad vs distancia.

## 8. Resultados

Al realizar en análisis se hace la selección del archivo de salida, típicamente es en un formato el cual se puede graficar, el procesamiento de datos, se hace con dichos archivos, la interpretación de los sistemas se hace a partir de dichos datosgráficas.

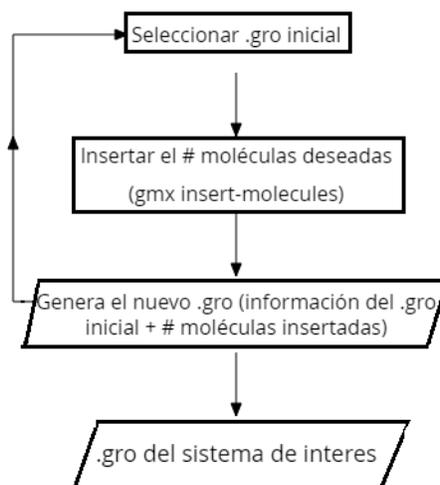


Figura 4.2: Metodología para la construcción de los sistemas.

### 4.3.2. Construcción de los sistemas

La metodología para construir los sistemas es básicamente la misma, independientemente si tenemos un tipo de molécula o muchos tipos de moléculas, a excepción del agua, cuando se inserta moléculas de agua al sistema GROMACS usa una paquetería específica para esta (en lugar de “insert-molecules” usa “solvate”), por que cuando las inserta escribe en el archivo .top el tipo de modelo de agua que se desea utilizar y el número de moléculas insertadas.

En la Figura 4.2 se muestra el diagrama de flujo para el caso de los sistemas. Se puede ver como dicho diagrama es más pequeño que el caso de la Figura 4.1 debido a que los archivos de entradas de las moléculas (con las geometrías optimizadas) son los archivos generados en la sección anterior, en el diagrama no se encuentran las etapas de ejecución de DM y procesamiento de datos, debido a que es básicamente igual al caso de las moléculas.

## 4.4. Metodología General

La metodología seguida para el estudio de todos los sistemas fue básicamente la misma, la diferencia entre los parámetros fue en cuestión del número de pasos realizados durante la simulación (con mayor número de moléculas o tamaño de las mismas hay que aumentar dichos número para llegar a una buena equilibración y tener simulaciones lo suficientemente estables), y el corte de energía (cut-off) (parámetro el cual está involucrado con el tamaño de los sistemas y de las moléculas involucradas).

De forma simple los pasos desde la construcción del sistema hasta la obtención de los resultados se enlistan a continuación:

1. Construcción de los archivos de entrada

Como se abordó en secciones anteriores, es necesario tener listos los archivos (.itp y .pdb para el campo de fuerza OPLS-aa) de las moléculas involucradas. Con las herramientas de GROMACS se pueden insertar el número de moléculas de forma azarosa deseada en la celda unidad y generar el nuevo archivo con las coordenadas de los átomos y moléculas del sistema. Escribir el archivo .top correspondiente a los datos del archivo de coordenadas.

2. Minimizar la energía del sistema

3. Equilibrar el sistema

La equilibración del sistema es un paso importante ya que de esto depende que el sistema no colapse en la corrida de producción y de tener resultados confiables; debido a esto para darle el tiempo suficiente para alcanzar una correcta equilibración el sistema y darle el suficiente tiempo para la misma se realizó una equilibración en tres pasos. Los tiempos de equilibración dependen del sistema, en general se usaron 3 pasos de equilibración 2 del tipo NPT y uno del tipo de NVT.

- NPT1

Esta equilibración se realiza a una alta presión (50-100 atm) y con el tiempo

suficiente para dejar que la caja se compacte (esto es debido que al armar el sistema la celda unitaria puede quedar muy grande).

- NVT

El propósito de este paso en la equilibración es borrar la memoria térmica del sistema y que la forma en la que acomodamos las moléculas en la caja no sea la responsable de la ubicación de las mismas. Se realiza una rampa de temperatura, y la temperatura final es la temperatura que se busca que tenga el sistema de estudio.

- NPT2

Este paso en la equilibración es para llevar a la caja a las condiciones de presión deseadas para el sistema, darle el suficiente tiempo para que se estabilice la caja y alcance el sistema las condiciones deseadas para el sistema.

4. Corrida de producción

5. Análisis de los archivos de salida

6. Posprocesamiento de datos

7. Resultados

El la Figura 4.3 se muestra la metodología general utilizada para el estudio de los sistemas.

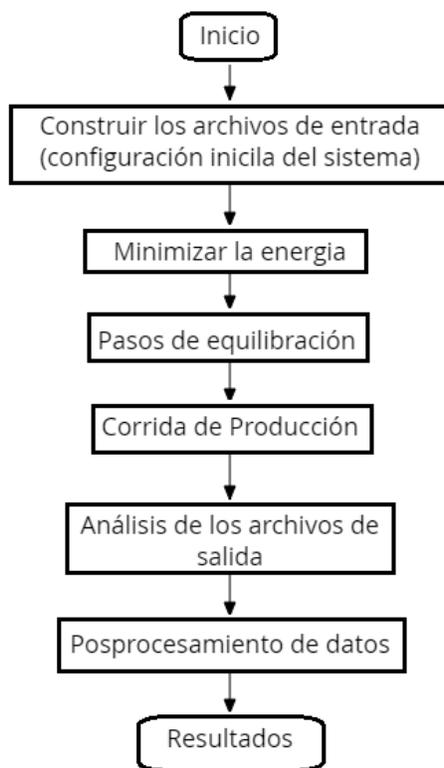


Figura 4.3: Metodología para la construcción de los sistemas.

# Capítulo 5

## Resultados

En este capítulo se presentan todos los resultados obtenidos para las moléculas y los sistemas estudiados a lo largo de la tesis. El capítulo se divide en tres principales secciones. En la primera sección se aborda la evaluación de las moléculas, esto se realizó para revisar la compatibilidad entre la geometría y la topología (el correcto funcionamiento de los inputs para el campo de fuerza seleccionado). En la siguiente sección se abordarán los resultados para el caso de los sistemas de un solo tipo de molécula (celdas unitarias las cuales contienen 100 moléculas de un solo tipo). En la última siguiente sección se presentan los principales resultados de la tesis, los resultados de las simulaciones de dinámica molecular realizadas para los sistemas de hidrocarburos de interés, donde en cada subsección se tratarán los resultados de los sistemas con las diferentes fracciones de agua.

Todos los datos se presentan con las barras de error proveniente del cálculo, en los casos que no se alcanzan a apreciar estas es debido a que no tienen un tamaño apreciable. Los inputs de las tipologías y geometrías iniciales de las moléculas se encuentran en el **Apéndice A** y las gráficas correspondientes a las funciones de distribución radial se adjuntan en el **Apéndice B**.

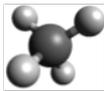
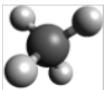
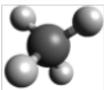
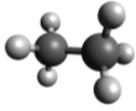
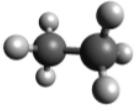
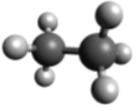
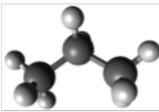
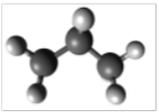
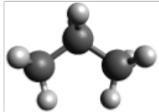
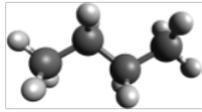
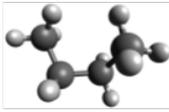
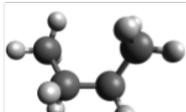
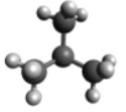
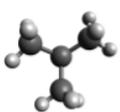
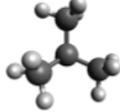
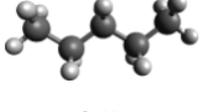
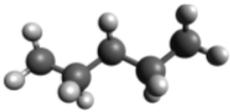
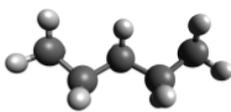
### 5.1. Moléculas de hidrocarburos.

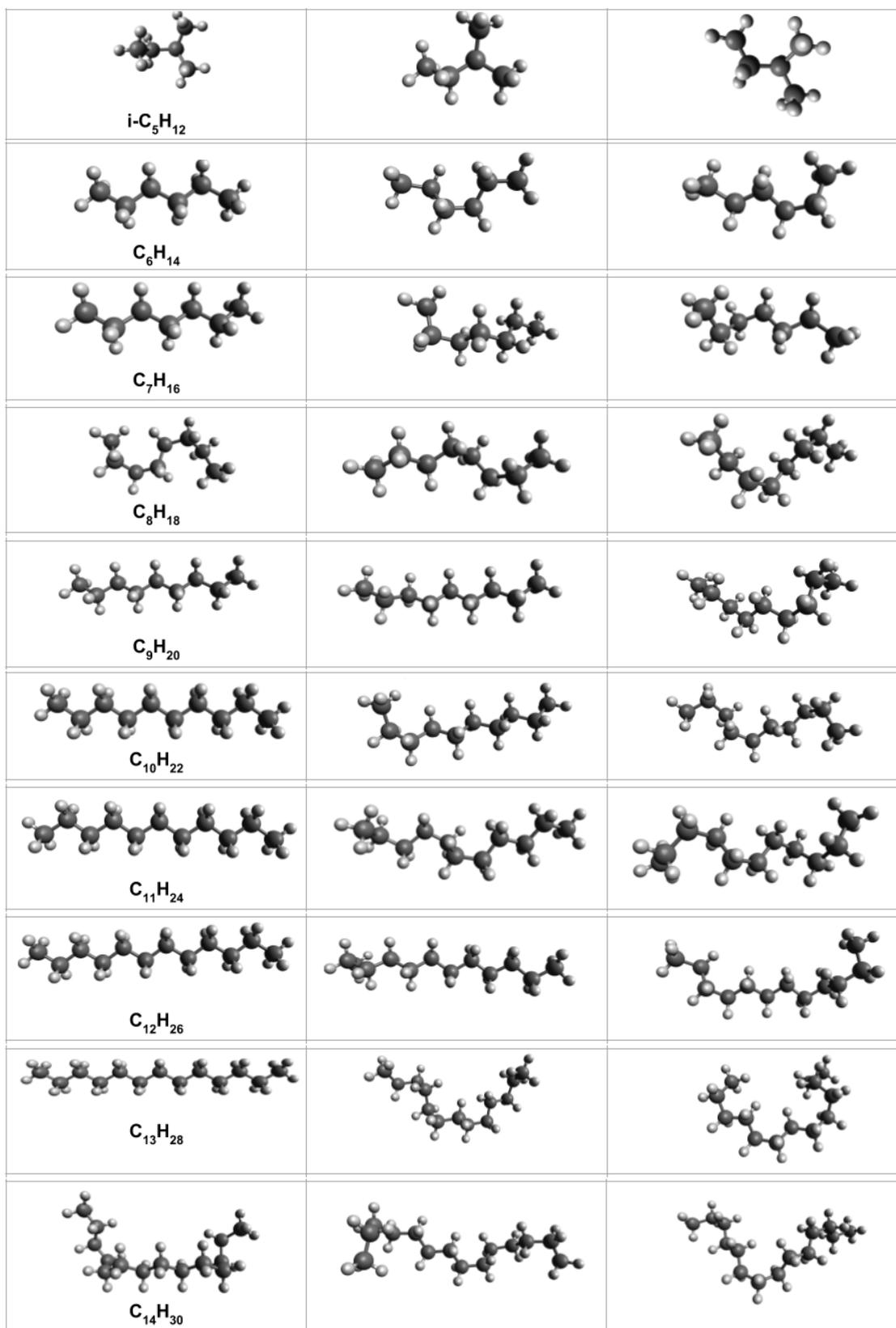
Se realizó la evaluación de las moléculas a dos condiciones diferentes: 1) 25°C y 2) 55°C, esto debido a que las condiciones de interés para realizar las simulaciones de los hidrocarburos es en las condiciones de yacimiento las cuales son a 55°C y a 35 atm. Como se mencionó en la metodología se realizaron las diferentes etapas para cada una de las moléculas (minimización, equilibración y corrida de producción), la corrida de producción tiene una duración de 1 ns (1000 ps). Las moléculas se evaluaron solas en la celda unidad con un cut-off de 1.7 nm. En esta sección primero se verá la conformación de las moléculas y después se hablará sobre la energía y algunos resultados de evaluaciones estructurales.

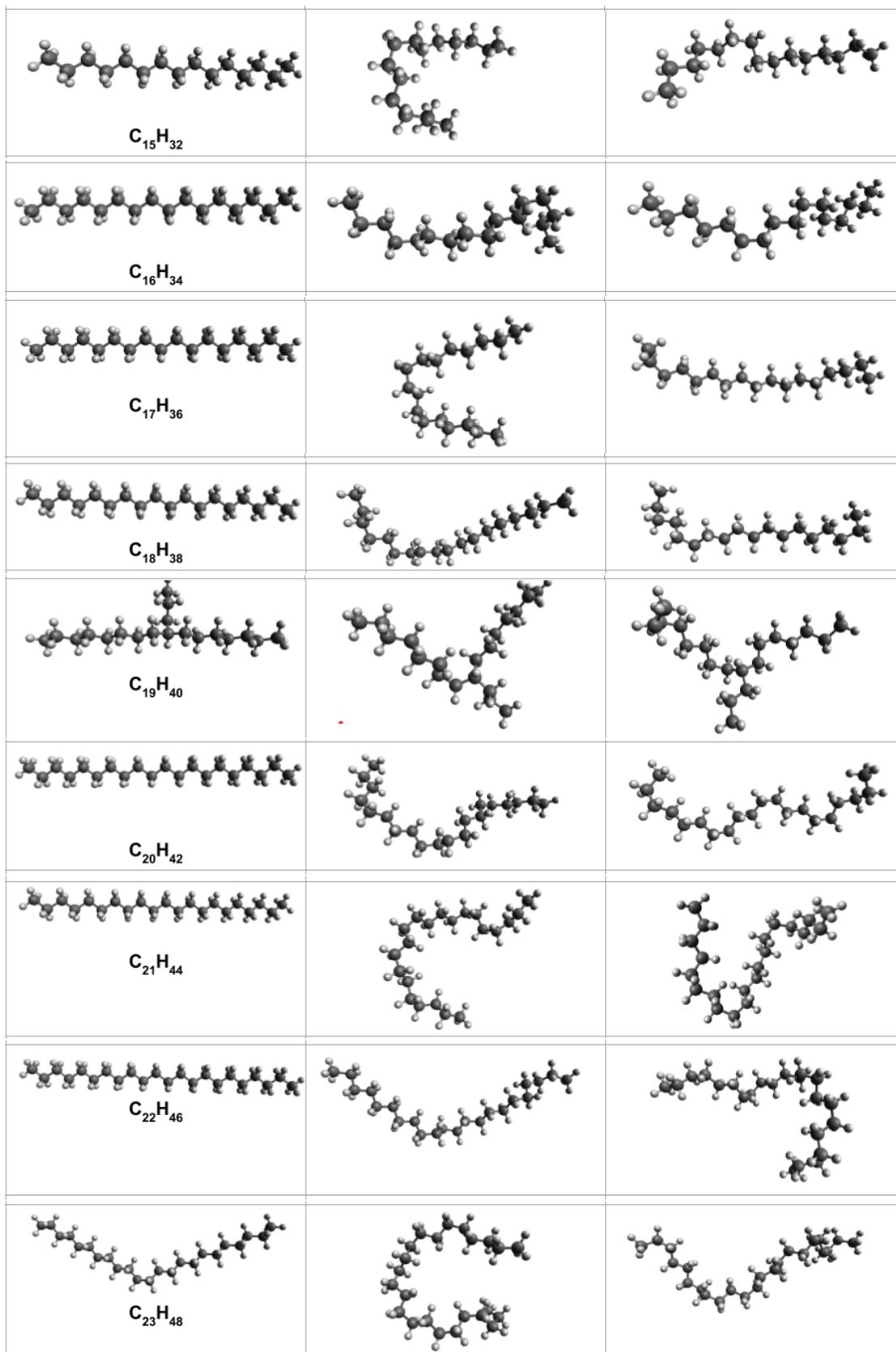
### 5.1.1. Conformación final de las moléculas

En la Tabla 5.1 se presenta la visualización de la molécula para tener una referencia del tipo de moléculas con las que se están trabajando y hacer la relación con los datos posteriormente obtenidos. Recordemos que las moléculas de hidrocarburos utilizadas en la tesis son alcanos saturados principalmente lineales, y sólo se manejaron 2 isómeros del tipo “i” y “n” para el caso de las cadenas de 4 y 5 carbonos.

En la Tabla 5.1 se muestra en la primer columna la conformación inicial de las moléculas, esta conformación es la que se obtuvo después de la optimización de la geometría (realizada por la plataforma ATB), si se desea ver la información de la topología y la geometría inicial se pueden consultar lo Apéndice A. Las siguientes dos columnas (Tabla 5.1) muestran la conformación final adoptada por la molécula después de la corrida de producción (para ambas condiciones).

Inicial	Final (25°C)	Final (55°C)
 CH <sub>4</sub>		
 C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>		
 C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>		
 n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>		
 i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>		
 n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>		





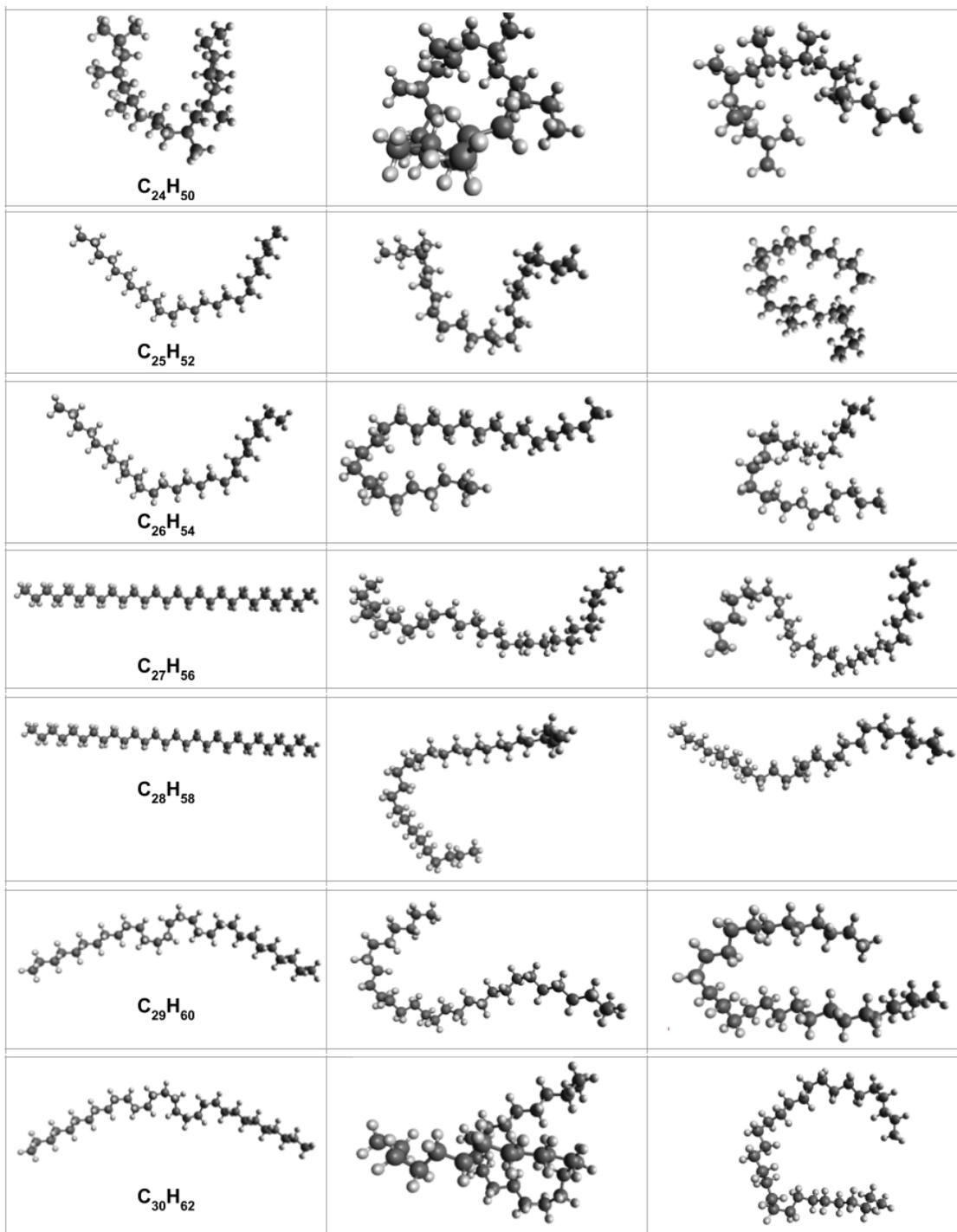


Figura 5.1: Visualización de la conformación inicial de los hidrocarburos (primera columna) y la conformación obtenida al final de la corrida de producción para las dos condiciones evaluadas.

A lo largo de la simulación de las moléculas, como fueron las moléculas aisladas en las cajas se puede observar como la molécula rota sobre su centro de masa (Se puede ver un ejemplo de esto en la Figura 5.2) y dependiendo de la energía en el sistema es la velocidad en la

rotación de la molécula, también se aprecia la flexibilidad de las moléculas, y la variación en las conformaciones adoptadas por las moléculas.

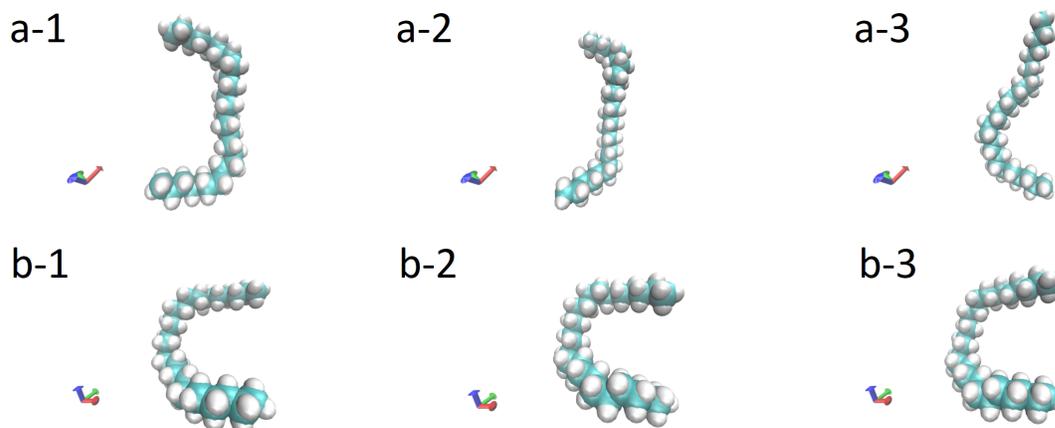


Figura 5.2: Imágenes instantáneas de la visualización de la corrida de producción a tres tiempos diferentes. Molécula  $C_{27}H_{56}$  a  $25^{\circ}C$  (a) y a  $55^{\circ}C$  (b). Visualizado por VMD, el tipo de visualización es por el radio de van der Waals.

La conformación de la molécula al final de la corrida de producción (en ambas condiciones) para todos los casos es un conformación diferente a la inicial de la molécula, lo cual nos indica cómo la información de los enlaces de las moléculas permitan dicha flexibilidad en acomodo de los átomos y la obtención de diferentes geometrías para la las moléculas.

Las moléculas:  $CH_2$ ,  $C_2H_6$ ,  $C_3H_8$ ,  $n-C_4H_{10}$ ,  $i-C_4H_{10}$ ,  $i-C_5H_{12}$  y  $n-C_5H_{12}$ , presentan conformaciones finales similares y no presentan mucha diferencia a la disposición atómica inicial. Para el caso de las moléculas  $C_9H_{20}$ ,  $C_{11}H_{24}$  y  $C_{12}H_{26}$  a  $25^{\circ}C$  presentan una configuración muy similar a la inicial (se hace hincapié en dicho hecho debido a que son moléculas grandes).

Se aprecia como para los casos de las moléculas con menos de 13 carbonos en la cadena las conformaciones continúan siendo prácticamente "lineales" para las condiciones a  $25^{\circ}C$  y a partir de los 13 carbonos las moléculas empiezan a presentar conformaciones plegadas. Para el caso de las moléculas a  $55^{\circ}C$  se presentan conformaciones más cerradas a partir de los 7 carbonos en la cadena.

Se puede ver cómo al aumentar el número de carbonos en la cadena, la molécula tiende a plegarse sobre sí misma, también no hay una conformación ó acomodo preferente a las temperaturas manejadas (no se observa una tendencia en el comportamiento de plegado).

Ahora se abordaron los resultados de algunos análisis.

### 5.1.2. Energía total

Se calculó la energía total del sistema contra el tiempo para cada caso, para facilitar la interpretación de los datos se obtuvo el promedio de la energía. En la Figura 5.3 se muestra el

promedio de la energía total contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo, los cuadros negros indican los casos evaluados a 25°C y los círculos rojos a 55°C. En la grafica podemos observar como el aumento en la energía del sistema es prácticamente lineal al igual que el número de carbonos en la cadena, la energía de las moléculas a 55°C es mayor que la de las moléculas a 25°C, lo cual tiene sentido ya que es un sistema a mayor temperatura, por lo que tenemos mayor energía cinética y al estar tratando con un sistema de una sola molécula prácticamente toda su energía se debe a su energía cinética. En los hidrocarburos con menor número de carbonos (metano, etano, propano ) no hubo mucha diferencia entre los valores de las energías. Para el caso de los isómeros  $iC_4H_{10}$  y  $nC_4H_{10}$  se obtuvo la misma energía, pero para el caso de  $i-C_5H_{12}$  y  $n-C_5H_{12}$  el primero presentó una mayor energía. El pentadecano es la molécula que presenta mayor diferencia entre las energías obtenidas para las diferentes condiciones. También se puede ver cómo a partir de los 16 carbonos en la cadena la diferencia entre las energías (para las condiciones evaluadas) es mayor que para el caso de las cadenas con menos carbonos.

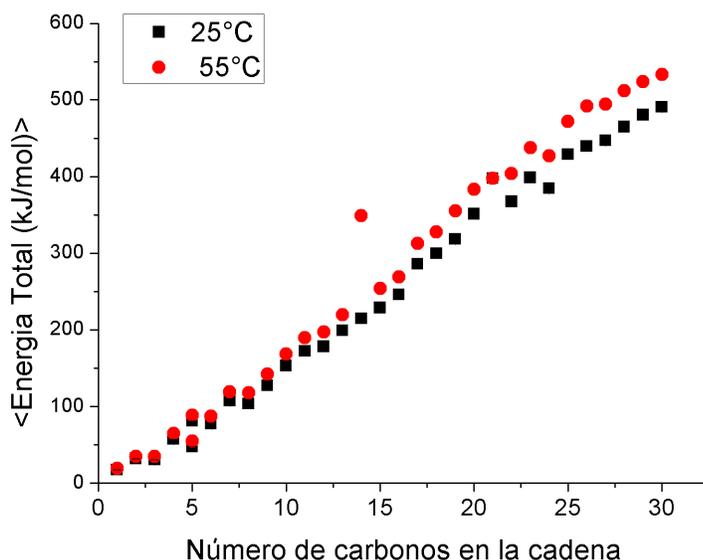


Figura 5.3: Promedio de la energía total contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo, los cuadros negros indican los casos evaluados a 25°C y los círculos rojos a 55°C.

### 5.1.3. Propiedades estructurales.

#### Radio de giro

El radio de giro representa el cuadrado de la distancia que, por término medio, separa a cada átomo que constituye la cadena del centro de masas de la macromolécula. Esta magnitud nos permite describir la estructura global de la molécula, dándonos una idea del tamaño de ésta. Se calculó el radio de giro de la molécula tomando de referencia el centro de masa con respecto el tiempo de la corrida de producción, para facilitar la visualización de los datos se

calculó el promedio de dicho dato y se graficó contra el número de carbonos en la cadena, como se muestra en la Figura 5.4. En la Figura 5.4 se identifican los valores correspondientes a las condiciones de 25°C y 55°C, con cuadros negros y círculos rojos respectivamente. En la gráfica de forma general se aprecia cómo al aumentar el número de carbonos en la cadena aumenta el radio de giro de la molécula, lo cual concuerda con el hecho de que la molécula va aumentando de tamaño.

Se puede ver como de 1 a 13 carbonos en la cadena el valor de radio de giro de la molécula es muy similar, pero a partir de los 14 carbonos empieza a presentar diferencias y a ser menos ordenado el aumento del radio de giro comparándolo con los primeros casos. Los casos de  $C_{18}H_{38}$ ,  $C_{23}H_{48}$ ,  $C_{26}H_{54}$  y  $C_{27}H_{56}$  son aquellos que presentan mayor diferencia entre los radio de giro de las moléculas.

Este comportamiento de los hidrocarburos con mayor número de carbonos también se puede observar en la conformación de dichas moléculas (Tabla 5.1), ya que las moléculas empiezan a plegarse sobre sí mismas, lo que reduce el radio de giro de la misma y también al aumenta el número de carbonos están aumentando el número de conformaciones disponibles para la misma.

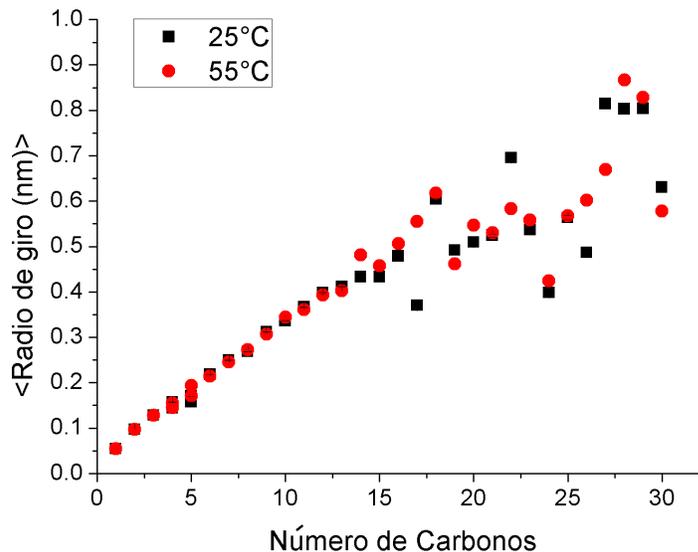


Figura 5.4: Promedio del radio de giro contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo, los cuadros negros indican los casos evaluados a 25°C y los círculos rojos a 55°C.

### Desviación media raíz cuadrática (RMSD) de las posiciones atómicas

La desviación media raíz cuadrática de las posiciones atómicas (o simplemente desviación media raíz cuadrática, RMSD) es la medida de la distancia promedio entre los átomos. Se calculó el RMSD de la molécula con respecto al tiempo, para facilitar la interpretación de los datos se calculó el promedio de dicho valor y se graficó con respecto el número de carbonos en la cadena. En la Figura 5.5 se muestra el promedio del RMSD contra el número de carbonos en la cadena, para las condiciones de 25° y 55°C, los cuadros negros y círculos

rojos señalan dichos casos respectivamente. Se puede ver que el comportamiento general del RMSD es de aumentar conforme aumenta el número de carbonos en la cadena, y los valores de las moléculas con menos de 13 carbonos son bastantes similares para ambas condiciones. El hecho de que el RMSD aumente con el número de carbonos tiene sentido debido a que el tamaño de la molécula está aumentando, lo que significa que la distancia entre los átomos a su vez aumenta (por ejemplo la distancia entre los extremos). Las moléculas  $C_{22}H_{29}$ ,  $C_{29}H_{60}$  y  $C_{30}H_{62}$  son las moléculas que presentan mayor diferencia entre los valores para las diferentes condiciones.

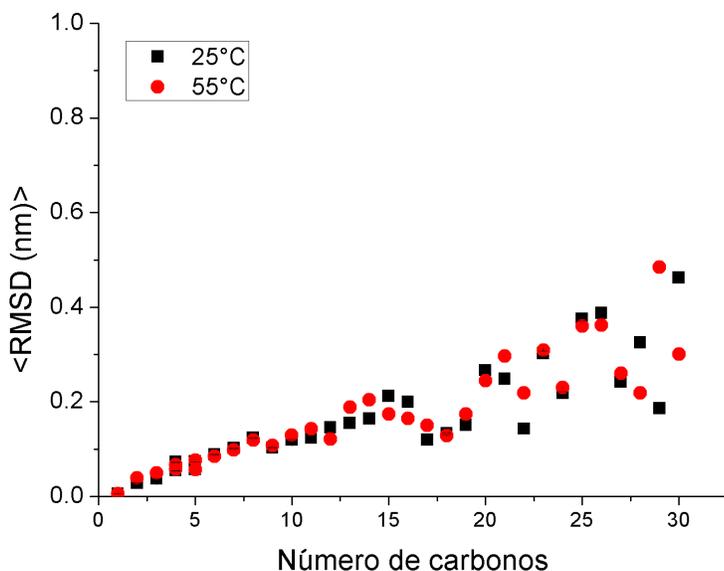


Figura 5.5: Promedio de la desviación media raíz cuadrática (RMSD) de las posiciones atómicas contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo, los cuadros negros indican los casos evaluados a 25°C y los círculos rojos a 55°C.

### RMSF (raíz de la fluctuación cuadrática media)

Es el cálculo de la desviación estándar de las posiciones atómicas en la trayectoria. Se calculó el RMSF de la molécula con respecto al tiempo y para facilitar la visualización de los datos el promedio de dicho valor. En la Figura 5.6 se muestra el promedio del RMSF con respecto el numero de carbonos en la cadena, los cuadros negros indican los valores para las moléculas a 25°C y los círculos rojos a 55°C. De forma general las fluctuaciones aumentan conforme aumenta el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo, para los casos con menos de 12 carbonos en la cadena se muestra un valor similar para ambas condiciones. Y para el caso de las moléculas con más de 13 carbonos tenemos un comportamiento más errático en el valor del promedio de las fluctuaciones, sin embargo en la mayoría de los casos los valores entre las diferentes condiciones son cercanos.

Esta diferencia en las fluctuaciones indica cómo al aumentar el tamaño de la cadena aumenta la flexibilidad de la misma y por lo tanto las fluctuaciones entre las conformaciones son mayores. Recordemos como para el caso de las moléculas, estas están solas en la caja y no

tienen interacciones con ningún otro componente más que consigo mismas, el comportamiento de la molécula en la corrida de producción es únicamente el de girar en su centro de masa y retorcer sus cadenas, estirarse, o sea tiene el movimiento debido a la energía cinética impuesta en el sistema para aparentar las condiciones de las diferentes temperaturas.

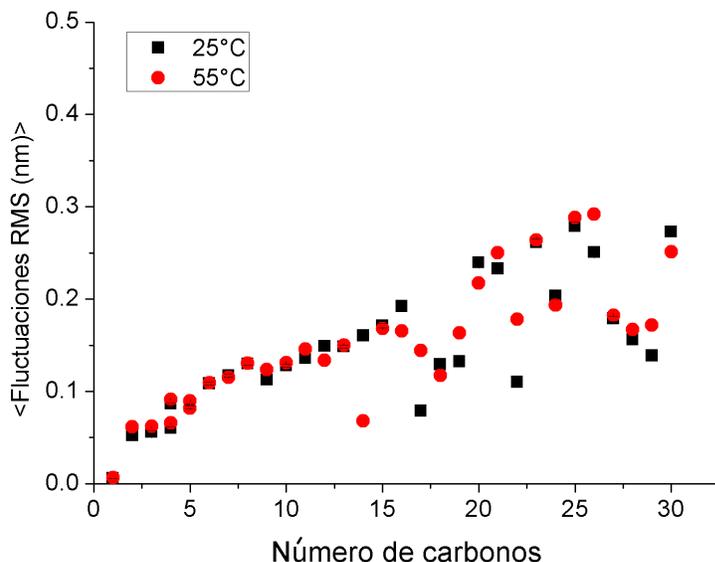


Figura 5.6: Promedio de la raíz de la fluctuación cuadrática media (RMSF) contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo, los cuadros negros indican los casos evaluados a 25°C y los círculos rojos a 55°C.

### Superficie accesible al solvente

Se calculó la superficie accesible al solvente (Véase Eisenhaber F, Lijnzaad P, Argos P, Sander C y Scharf M (1995) J. Comput. Chem. 16, 273-284 para el algoritmo utilizado), hay que recordar que para el caso de la evaluación de la molécula no contamos con ningún solvente en el sistema, es únicamente la molécula en el vacío, por lo que la conformación que adopta nos da información acerca de las interacciones consigo misma y las condiciones impuestas al sistema (tal como la temperatura, o sea la energía cinética con la que se está manejando). Entonces se calculó la superficie accesible al solvente de la molécula con respecto al tiempo, considerando que la conformación de la molécula en el sistema es debido a las interacciones consigo misma.

En la Figura 5.7 se muestra el promedio de la superficie accesible al solvente contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo, los cuadros negros indican los valores para las moléculas a 25°C y los círculos rojos para aquellas a 55°C. En la gráfica se puede observar cómo al aumentar el tamaño del hidrocarburo aumenta la superficie accesible, como los valores son independientes a la temperatura del sistema (debido a que se obtienen valores prácticamente iguales para ambas condiciones), aunque alrededor de 16 y 22 carbonos se pierde un poco el aumento lineal de dicha propiedad. Este aumento en el área superficial se puede asociar al tamaño de la molécula.

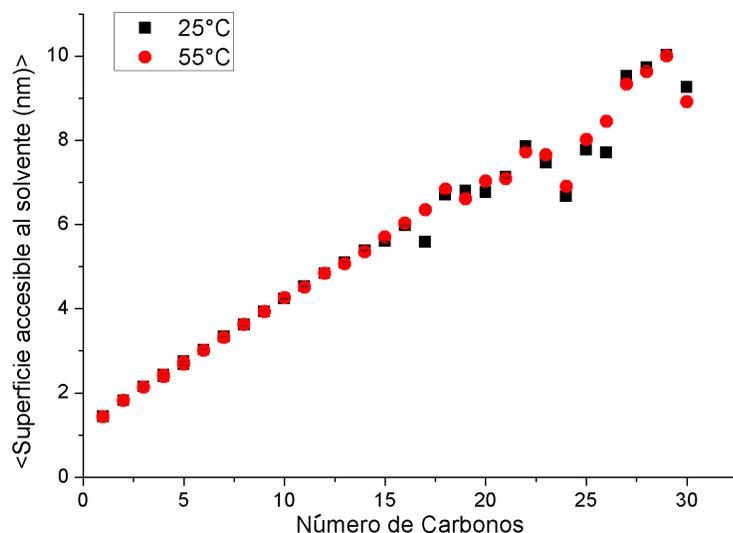


Figura 5.7: Promedio de la superficie accesible al solvente (SASA) contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo, los cuadros negros indican los casos evaluados a 25°C y los círculos rojos a 55°C.

#### 5.1.4. Resumen-Discusión

Como resultado de esta evaluación, obtuvimos que para las moléculas de hidrocarburos seleccionadas se realizó una correcta construcción de la topología y se llevó una adecuada optimización de la geometría para tener un buena conformación inicial. Se vio que el cut-off que permitió realizar las corridas de manera adecuada fue de 1.7 nm. Con el cálculo de la energía se puede ver como el caso de dinámica molecular si es posible considerar diferentes condiciones para el mismo sistema.

Se presentó como las condiciones iniciales (geometría) y la información de los enlaces y energía de la molécula (topología) permite flexibilidad de la estructura de la cadena y se obtiene una simulación estable utilizando el campo de fuerza OPLS-aa (con las condiciones impuestas en el sistema). Los resultados muestran cómo el comportamiento estructural-conformacional de la molécula va cambiando con el tamaño de la misma (número de carbonos en la cadena).

Con los diferentes parámetros evaluados para las moléculas se pueden ver como estos dependen del número de carbonos en la cadena del hidrocarburo, como las condiciones en la topología de la molécula permite el movimiento y flexibilidad de la misma sin desestabilizar la simulación (lo cual ocurre cuando un átomo se mueve a enlaces o sustancias prohibidas o las cuales no satisfacen las condiciones del tipo de enlace), se observó cómo es posible simular diferentes condiciones (temperatura) en este tipo de simulaciones. De los parámetros evaluados (radio de giro, RMSD, fluctuaciones RMS y superficie accesible) se vio como estos aumentaban de forma que aumentaba el número de carbonos en la cadena, debido al aumento del tamaño de la misma, el aumento en la posibilidad de geometrías en la misma, para el caso de las moléculas con menos de 13 carbonos en la cadena el aumento de dichos valores se presentó prácticamente de forma lineal y la diferencia entre los valores para las

diferentes condiciones en las que se evaluaron las moléculas no presentan mucha diferencia, sin embargo para el caso de las moléculas que contaban con 13 carbonos en adelante la diferencia entre dichos valores aumentan y también se pierde un poco el comportamiento lineal que se presentó en las primeras, para el caso de la superficie accesible al solvente (lo cual debido a que la simulación es de una molécula aislada y solo nos habla este valor de su conformación) no se presentó una diferencia apreciable entre las dos condiciones evaluadas. Entonces en resumen al aumentar el número de carbonos aumenta el radio de giro, el RMSD, el RMSF y la superficie accesible, propiedades las cuales se pueden asociar al tamaño y flexibilidad de la cadena. Esto dio un buen indicio de que se los parámetros iniciales para los hidrocarburos eran adecuados para proceder con la construcción de los sistemas de hidrocarburos.

## **5.2. Sistemas con un solo tipo de moléculas**

Para asegurarnos de que los parámetros de las moléculas eran viables para trabajar con las mezclas, se analizó el comportamiento de las moléculas interactuando con el mismo tipo de molécula. Para esto, se armaron cajas con 100 moléculas del mismo tipo, se realizaron los mismos pasos para la simulación (minimización, equilibración, producción). La corrida de producción se realizó por un tiempo de 5000 ps (5 ns). Las condiciones a las que se efectuaron estas simulaciones son a 55°C y 34 atm. Se le fue aumentando el tiempo para la equilibración de los sistemas conforme se aumentó el tamaño de la molécula de interés.

### **5.2.1. Configuración del sistema**

Previamente a la evaluación de los diferentes parámetros de interés, se muestran a continuación la configuración en algún momento (al azar) de la corrida de producción para los diferentes sistemas (34 sistemas, uno para cada uno de las moléculas evaluadas) visualización del sistema realizada por VMD (el tipo de visualización en el del radio de Van der Waals). Como las moléculas que se presentan en el sistema son del mismo tipo, para facilitar una mejor visualización del sistema se presentan las moléculas a diferentes colores. Debido al gran número de sistemas a describir se separaron en series de 6.

En la Figura 5.8 se presentan los sistemas de las moléculas metano, etano, propano, isobutano, n-butano e isopentano, se puede apreciar cómo las moléculas presentan distancias diferentes entre ellas, y entre más pequeña es la molécula las distancias entre las moléculas son más grandes, esta forma en la que se ven los sistemas es como si los mismos se encuentran en estado gaseoso, lo que concordaría a las condiciones establecidas para la simulación del sistema.

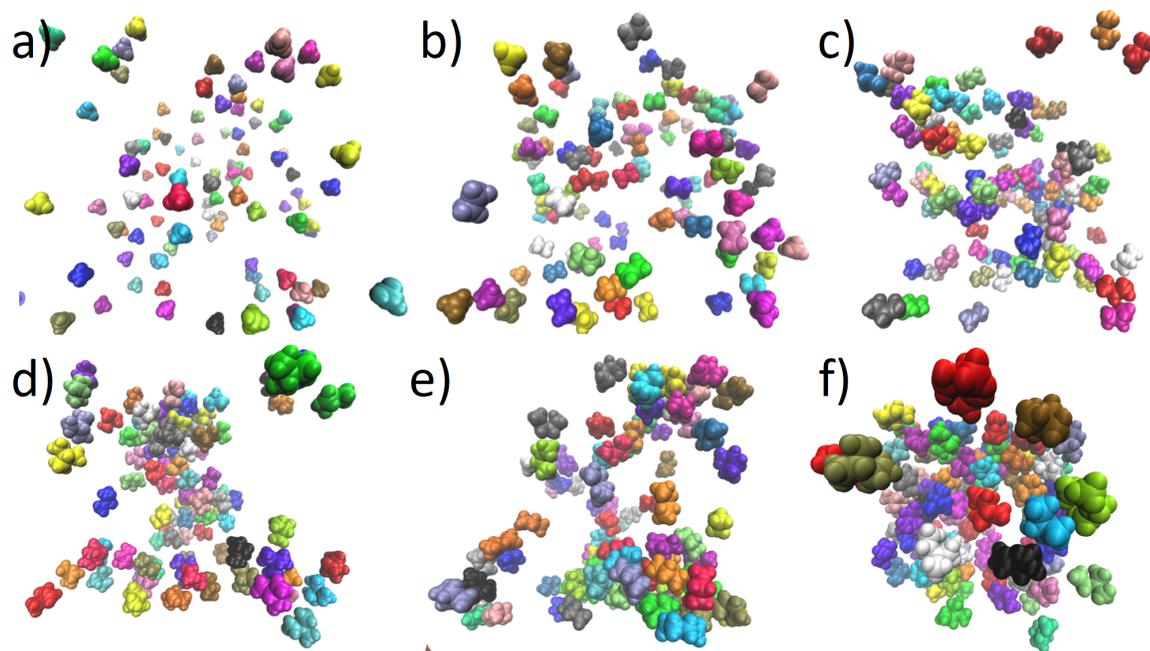


Figura 5.8: Visualización por VMD de los sistemas de las moléculas metano(a), etano (b), propano (c), isobutano (d), n-butano(e) e isopentano (f). El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

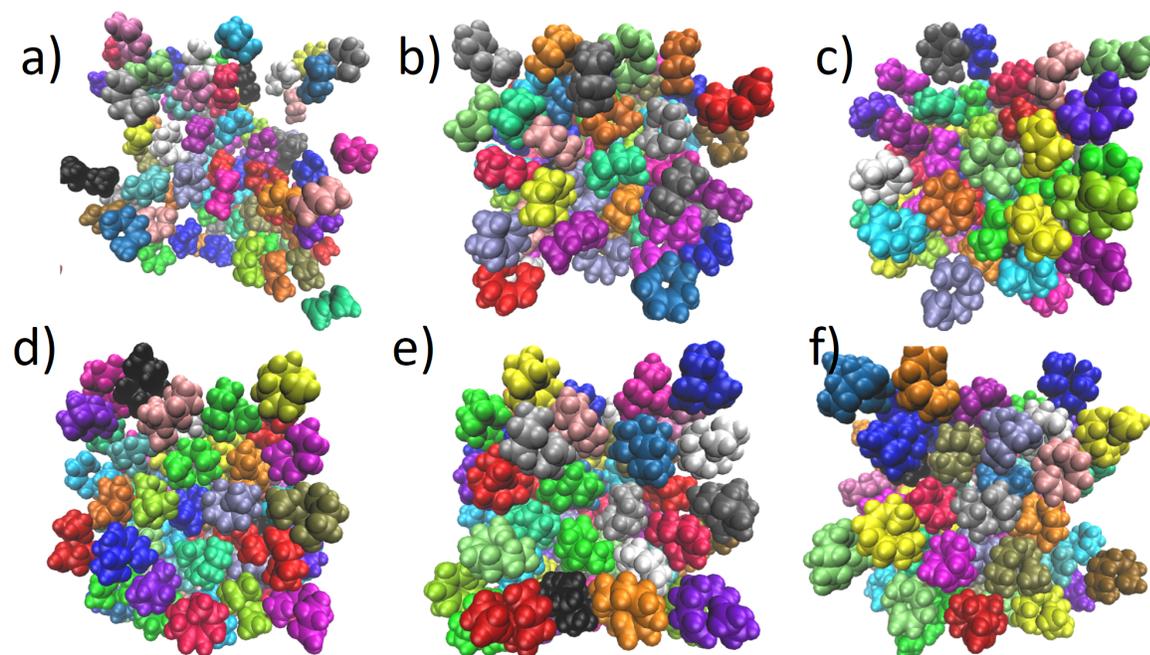


Figura 5.9: Visualización por VMD de los sistemas de las moléculas n-C<sub>5</sub>H<sub>12</sub> (a), C<sub>6</sub>H<sub>14</sub> (b), C<sub>7</sub>H<sub>16</sub> (c), C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> (d), C<sub>9</sub>H<sub>20</sub> (e) y C<sub>10</sub>H<sub>22</sub> (f). El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

En la Figura 5.9 se presentan la visualización de los sistemas para las moléculas de  $n\text{-C}_5\text{H}_{12}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_{14}$ ,  $\text{C}_7\text{H}_{16}$ ,  $\text{C}_8\text{H}_{18}$ ,  $\text{C}_9\text{H}_{20}$  y  $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ , se ve como para el caso de  $n$ -pentano aun presentamos distancias variadas entre las moléculas vecinas (tomando cualquiera molécula de referencia), y a partir del hexano empezamos a ver una continuidad en la distancia entre las moléculas y conforme aumenta el número de carbonos en la cadena se aprecia menos espacios vacíos en la visualización, esto también tiene sentido con el comportamiento experimental conocido para dichas moléculas, las cuales presentan un punto de ebullición más elevado a las condiciones establecidas para los sistemas (valores reportados a condiciones atmosféricas). También se puede ver cómo las moléculas están plegadas sobre sí mismas, y alrededor de estas se encuentran las otras (como se acomodaran como engranajes).

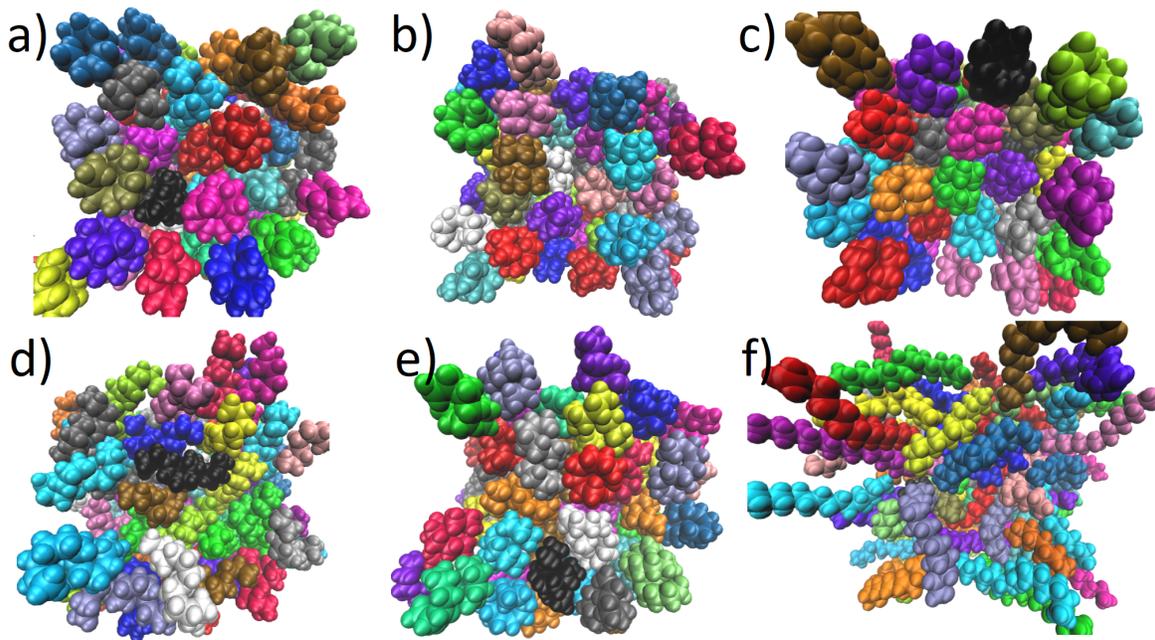


Figura 5.10: Visualización por VMD de los sistemas de las moléculas  $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$  (a),  $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$  (b),  $\text{C}_{13}\text{H}_{28}$  (c),  $\text{C}_{14}\text{H}_{30}$  (d),  $\text{C}_{15}\text{H}_{32}$  (e) y  $\text{C}_{16}\text{H}_{34}$  (f). El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

En la Figura 5.10 se pueden ver las imágenes correspondientes a los sistemas de  $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$ ,  $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ ,  $\text{C}_{13}\text{H}_{28}$ ,  $\text{C}_{14}\text{H}_{30}$ ,  $\text{C}_{15}\text{H}_{32}$  y  $\text{C}_{16}\text{H}_{34}$ , observamos también cómo estas moléculas también se están plegando sobre sí mismas, en forma de espiral y alrededor de estas se encuentran las otras con conformaciones similares, a partir de  $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$  vemos como el acomodo de las moléculas empieza a variar un poco, ya que no todas se pliegan sobre sí mismas algunas que ya se empiezan a intercalar entre la posición de las otras adyacentes, aun así en varias el acomodo es tipo espiral, sin embargo el hexadecano presenta un comportamiento y conformación diferente, aquí las moléculas están entrelazadas entre sí, y no están plegadas sobre sí mismas, y la forma en la que está el sistema indica que posiblemente el tiempo de la simulación no fue suficiente y que la forma de acomodar las moléculas al inicio debió de haber sido más errática si se deseaba obtener un sistema más homogéneo.

En la Figura 5.11 se tiene la visualización de los sistemas de  $C_{17}H_{36}$ ,  $C_{18}H_{38}$ ,  $C_{19}H_{40}$ ,  $C_{20}H_{42}$ ,  $C_{21}H_{44}$  y  $C_{22}H_{46}$ , para el caso de los sistemas de 17, 18, y 22 carbonos en la cadena, se ve un orden en el acomodo de las moléculas, esto ocurrió al momento de la construcción de la caja, pero esto no intervino con la estabilidad de la simulación, debido al tamaño de las moléculas estas no se pudieron desplazar y la corrida de producción tenemos dichas moléculas vibrando sobre su mismo espacio ya que está muy ordenado el sistema, esto es interesante debido a que cuando se hace la construcción de los sistemas la paqueteria de GROMACS tiende a agregar las moléculas de forma azarosa pero debido a la linealidad de estas moléculas el paquete "insert-molecules" de GROMACS para estos casos las acomodo de forma ordenada, y los parámetros en las que se realizaron las etapas para la simulación no llegaron a ser inestables. Para el caso de las moléculas de 19, 20 y 21 carbonos, se ve como se obtuvo un sistema más homogéneo y las moléculas están en diferentes conformación dentro de la caja, también se puede ver como empiezan a acomodar e intercalar para cubrir mejor el volumen de la caja.

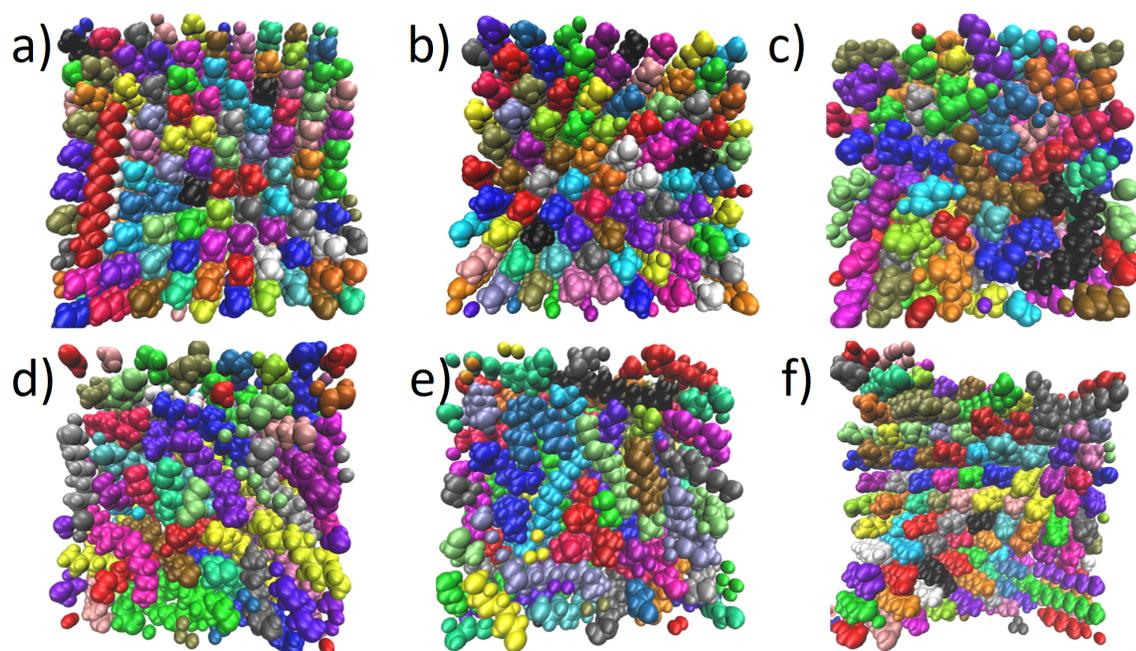


Figura 5.11: Visualización por VMD de los sistemas de las moléculas  $C_{17}H_{36}$  (a),  $C_{18}H_{38}$  (b),  $C_{19}H_{40}$  (c),  $C_{20}H_{42}$  (d),  $C_{21}H_{44}$  (e) y  $C_{22}H_{46}$  (f). El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

En la Figura 5.12 se pueden ver los sistemas de  $C_{23}H_{48}$ ,  $C_{24}H_{50}$ ,  $C_{25}H_{52}$ ,  $C_{26}H_{54}$ ,  $C_{27}H_{56}$  y  $C_{28}H_{58}$ , se presenta un caso similar al octadecano con los sistemas de  $C_{27}H_{54}$  y  $C_{28}H_{58}$ , el resto presenta un acomodo homogéneo en cuestión de que las moléculas se entrelazan y acomodan para disminuir el volumen libre en la caja, lo cual se esperaría para esta clase de hidrocarburos.

En la Figura 5.13 se pueden ver las visualizaciones correspondientes a los sistemas  $C_{29}H_{60}$  y  $C_{30}H_{62}$ , tenemos para ambos casos como las moléculas no se están entrelazando sobre

si mismas sino que si se acomodan en el sistema y las conformaciones disponibles para la molécula son variadas.

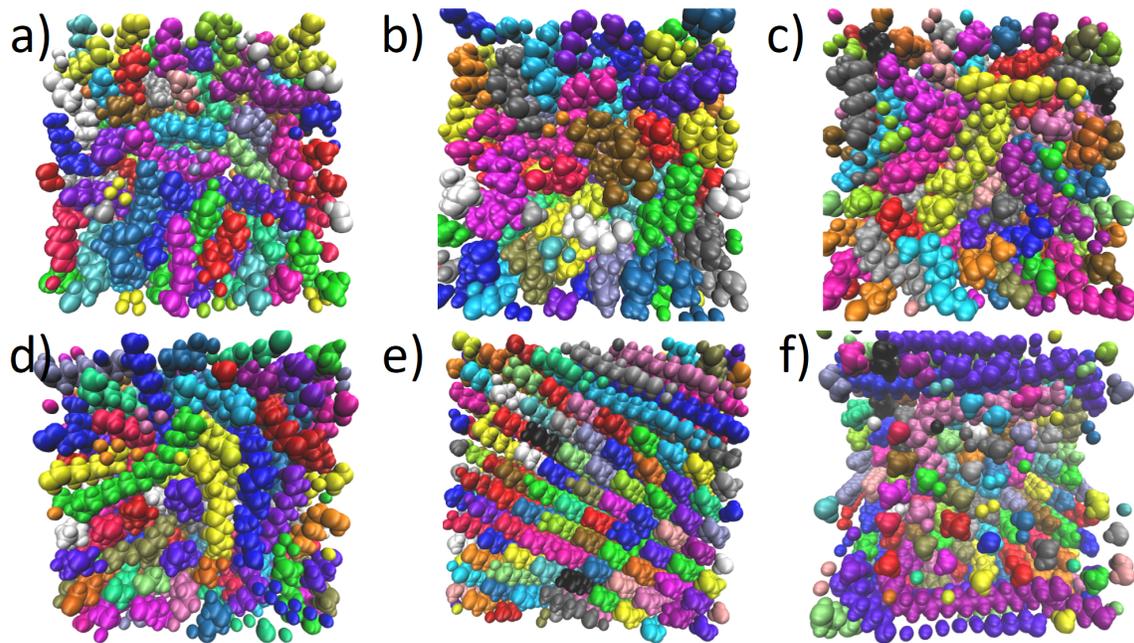


Figura 5.12: Visualización por VMD de los sistemas de las moléculas  $C_{23}H_{48}$  (a),  $C_{24}H_{50}$  (b),  $C_{25}H_{52}$  (c),  $C_{26}H_{54}$  (d),  $C_{27}H_{56}$  (e) y  $C_{28}H_{58}$  (f). El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

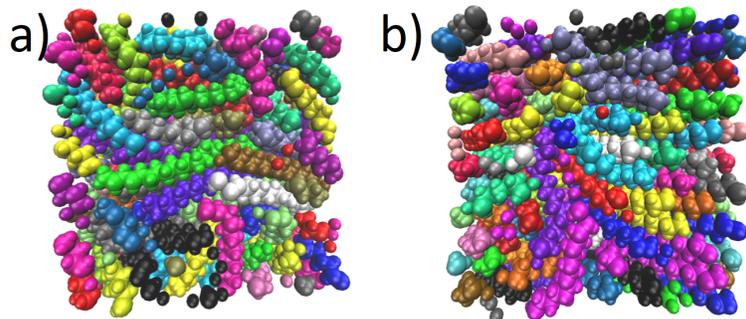


Figura 5.13: Visualización por VMD de los sistemas de las moléculas  $C_{29}H_{60}$  (a) y  $C_{30}H_{62}$  (b). El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

De acuerdo a lo que se pudo apreciar en las visualización para los diferentes sistemas simulados, para el caso de algunas moléculas las cuales su configuración inicial era una linealidad que le permitió a GROMACS agregarlas a la caja de forma ordenada (suponemos), y este las condiciones de las moléculas e información de los enlaces no presentó ningún problema para la simulación. Vemos como para el caso de las moléculas con menor número de carbonos

los sistemas observados aparentan un acomodo tipo gas y para el resto de los sistemas se presentan el acomodo de las moléculas de forma más ordenada y compacta, también como para el caso de las moléculas con menos de 13 carbonos en la cadena estas tienden a plegarse a sí mismas o acomodarse en forma de espiral, sin embargo para las moléculas con más de 13 carbonos en la cadena se ve cómo las moléculas empiezan a acomodarse adecuadamente alrededor de otras para disminuir los espacios libres, ya para moléculas aún más grande vemos como estas se tipo entrelazan (ya no se ve que se pliegan con sí mismas).

### Visualización de la corrida de producción (algunos casos).

El comportamiento de los sistemas en la corrida de producción depende de la molécula y el tamaño de la misma. Sería demasiado agregar la visualización de todos los sistemas a diferentes tiempos de la corrida de producción, sin embargo para dar a conocer el comportamiento de los sistemas se mostrarán la visualización a tres diferentes tiempos de la corrida de producción (tiempos cercanos entre sí), para tener una idea de la movilidad del sistema a las condiciones impuestas en la simulación. Los sistemas a visualizar seleccionados fueron los casos del metano, pentano, decano, pentadecano, eicosano, pentacosano y triacontano.

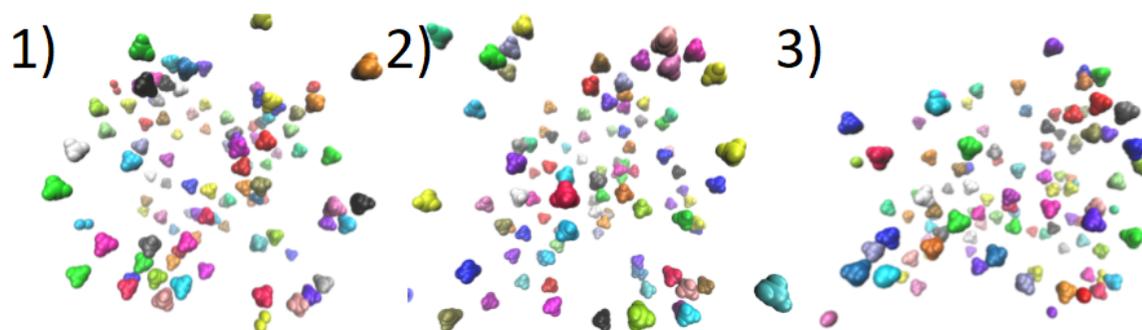


Figura 5.14: Visualización a diferentes tiempos de la simulación del metano por VMD. El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

En la Figura 5.14 se presenta la visualización a diferentes tiempos de la simulación del metano, como ya se mencionó anteriormente (sección anterior) el comportamiento de los primeros sistema (sistemas con las moléculas de menor tamaño) es parecido al del gas, por lo que el movimiento de las moléculas en el sistema es “rápido”, por lo que se obtienen configuraciones del sistema completamente diferentes entre un instante y otro en la simulación. En la Figura 5.15 se tiene la visualización del pentano, la configuración presentada del sistema entre un instante y otro es diferente, sin embargo se puede seguir el desplazamiento de la molécula en la caja si se toma alguna de referencia, pero la movilidad de las moléculas sigue siendo bastante.

En la Figura 5.16 se presenta el caso del decano, tenemos un la configuración diferente entre instantes, sin embargo el desplazamiento de las moléculas es prácticamente en el primer

plano y se puede hacer el seguimiento de las mismas de manera muy sencilla, se ve como el comportamiento en el sistema es diferente, tenemos un sistema que fluye más lento a los casos anteriores (pero sigue fluyendo).

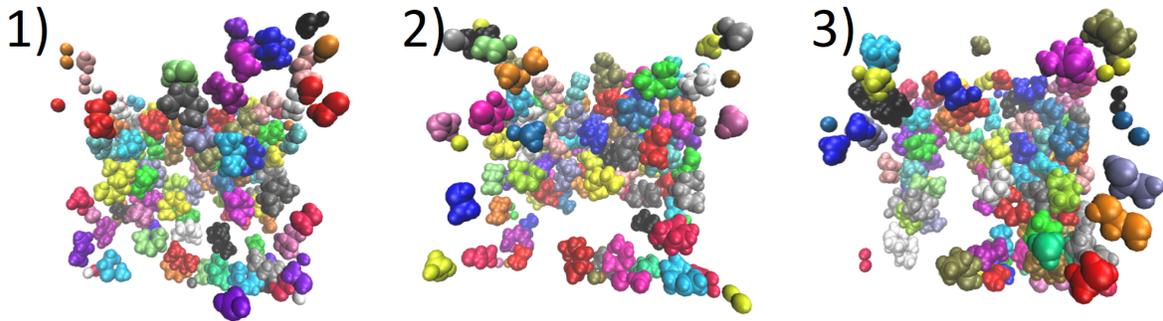


Figura 5.15: Visualización a diferentes tiempos de la simulación del pentano por VMD. El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

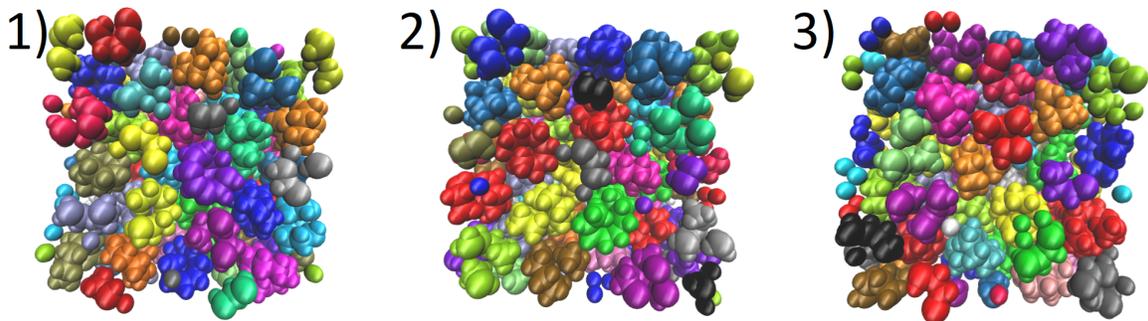


Figura 5.16: Visualización a diferentes tiempos de la simulación del decano por VMD. El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

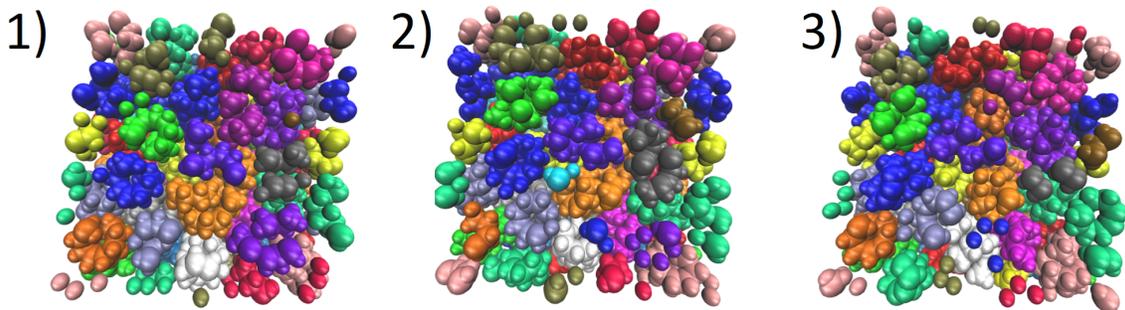


Figura 5.17: Visualización a diferentes tiempos de la simulación del pentadecano por VMD. El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

En la Figura 5.17 se visualiza el sistema del pentadecano, aquí la diferencia entre el sistema entre un instante y otro es muy poca, si existe el movimiento, pero las moléculas alrededor de una de referencia siguen siendo las mismas para los tres instantes ( lo que nos habla de la lentitud en la que pueden fluir/difundir las mismas en el sistema).

En la Figura 5.18 se presenta la visualización del eicosano, para este caso se ve una mayor diferencia que el caso del pentadecano, entre instantes del sistema posiblemente esto es debido a la conformación de las moléculas en el mismo, en el caso del pentadecano las moléculas aún tienden a adoptar forma de espiral, para este caso las moléculas ya se encuentran entrelazadas entre sí, por lo que probablemente esto ayude al momento de fluir en el sistema.

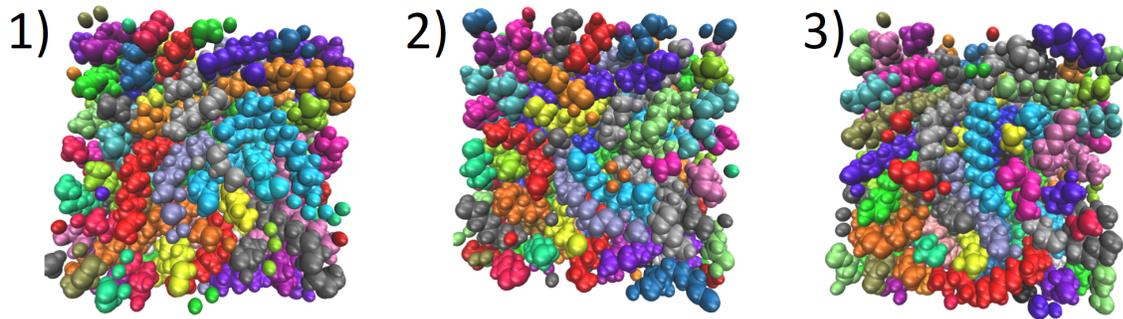


Figura 5.18: Visualización a diferentes tiempos de la simulación del eicosano por VMD. El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

En la Figura 5.19 se presenta el caso del pentacosano, se pueden percibir las diferencias entre los diferentes instantes en el sistema, pero se puede hacer el seguimiento de las moléculas y el acomodo alrededor de alguna de referencia es muy similar entre un instante y otro.

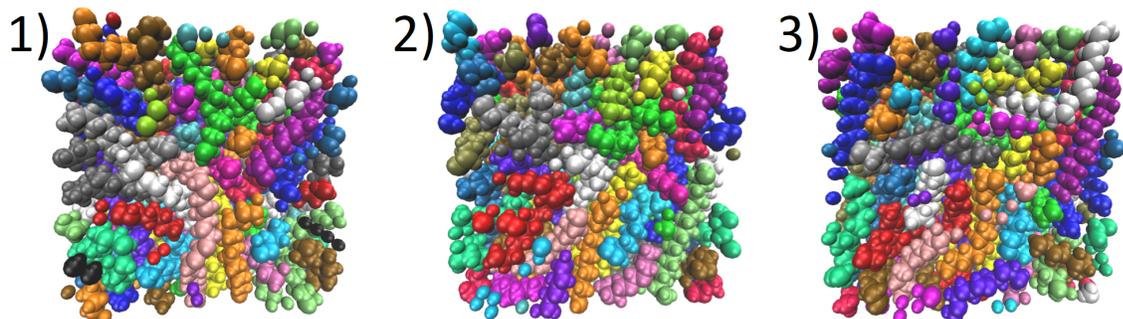


Figura 5.19: Visualización a diferentes tiempos de la simulación del pentacosano por VMD. El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

En la Figura 5.20 tenemos la visualización para el caso del triacontano, para este caso vemos

que no existe mucha diferencia entre un instante y otro, la diferencia a simple vista podría ser imperceptible pero las moléculas siguen moviéndose y se alcanza a distinguir un ligero desplazamiento de las mismas entre un tiempo y otro.

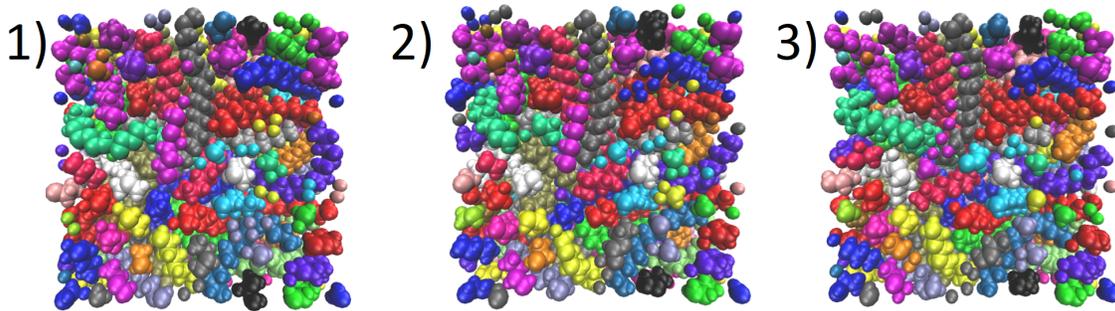


Figura 5.20: Visualización a diferentes tiempos de la simulación del triacontano por VMD. El tipo de visualización es con los radios de van der Waals en un instante al azar de la corrida de producción.

La visualización de estos diferentes sistemas a diferentes tiempos de la simulación (tiempos cercanos entre si), permite ver cómo a pesar de que las moléculas tienen los mismos elementos y lo único que varía en la misma es el número de átomos que la conforman, debido a esto y a las condiciones impuestas para la simulación se presentan comportamientos en el mismo, al menos en este caso podemos distinguir el cambio en la forma de fluir de estos hidrocarburos para estos casos, y de cómo tiene efecto en el comportamiento la conformación que adopta la molécula en el sistema.

Ahora se aborda el resultado del cálculo de algunos parámetros de las moléculas.

## 5.2.2. Propiedades estructurales.

### Radio de giro

Como se mencionó en las secciones anteriores el radio de giro es un parámetro que te permite conocer la estructura global de la molécula, se evaluó dicho parámetro para ver si tiene efecto en dicha conformación la presencia de moléculas del mismo tipo en el sistema.

En la Figura 5.21 se presenta el promedio del radio de giro (evaluado desde el centro de masa) con respecto al número de carbonos en la cadena del hidrocarburo. Se puede ver como el radio de giro del isobutano y n-butano es prácticamente el mismo valor (el valor para el n-butano es mayor por una décima al del isobutano), y para el caso del isopentano es la molécula que obtuvo el mayor valor para este parámetro. Para los casos con menor número de carbonos en la cadena (metano, etano, propano, butano) a pesar del valor las configuraciones posibles de la molécula no son muchas. Pero para el caso de las moléculas con mayor número de carbonos tiene sentido que se obtenga un valor mayor para el radio de giro ya que las conformaciones posibles para la molécula también aumentan.

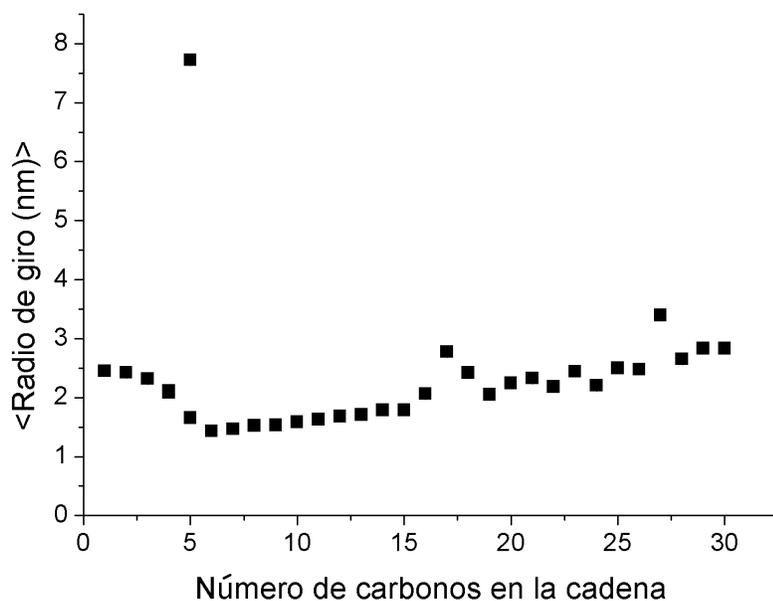


Figura 5.21: Promedio del radio de giro contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo

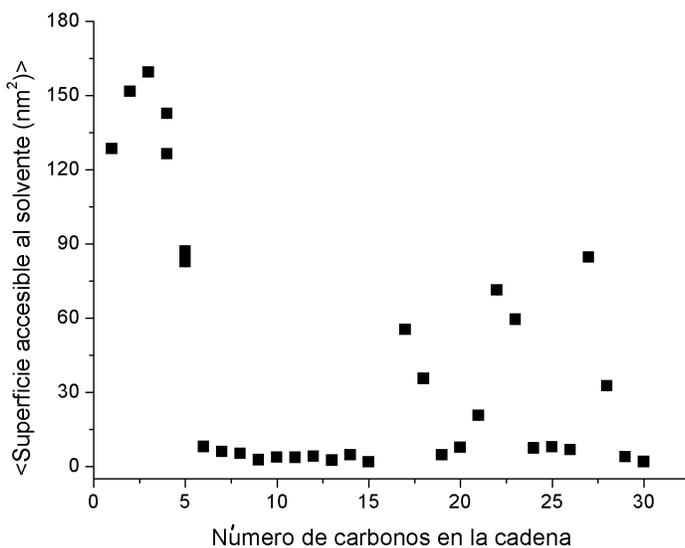


Figura 5.22: Promedio de la superficie accesible al solvente contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo

### Superficie accesible al solvente

Como se mencionó en secciones anteriores, este parámetro nos da información de la conformación de la molécula debido a la presencia de otras en el sistema, para este caso estaríamos viendo el efecto de la presencia de moléculas del mismo tiempo sobre la molécula (ya que

el sistema no tiene moléculas de ningún solvente). En la Figura 5.22 se muestra el promedio de la superficie accesible con respecto al número de carbonos en la cadena del hidrocarburo. Los valores más elevados que se obtienen son de las moléculas con menor número de carbonos (metano, etano, propano), esto también se puede inferir a la conformación que adopta y el comportamiento de dichos sistemas ( las moléculas no cambian su configuración y la probabilidad de tener moléculas alrededor unas de otras es menor), para el caso de las moléculas de 6 a 15 carbonos se pudo ver en las secciones anteriores que las moléculas tendían plegarse a si mismas (en forma de espiral) lo que también deja menos superficie disponible, pero para moléculas con mayor número de carbonos podíamos obtener otra clase de conformaciones que dejan superficie disponible para interactuar con otras moléculas.

### 5.2.3. Propiedades relacionadas a la movilidad de las moléculas en el sistema.

#### Desplazamiento cuadrático medio (MSD)

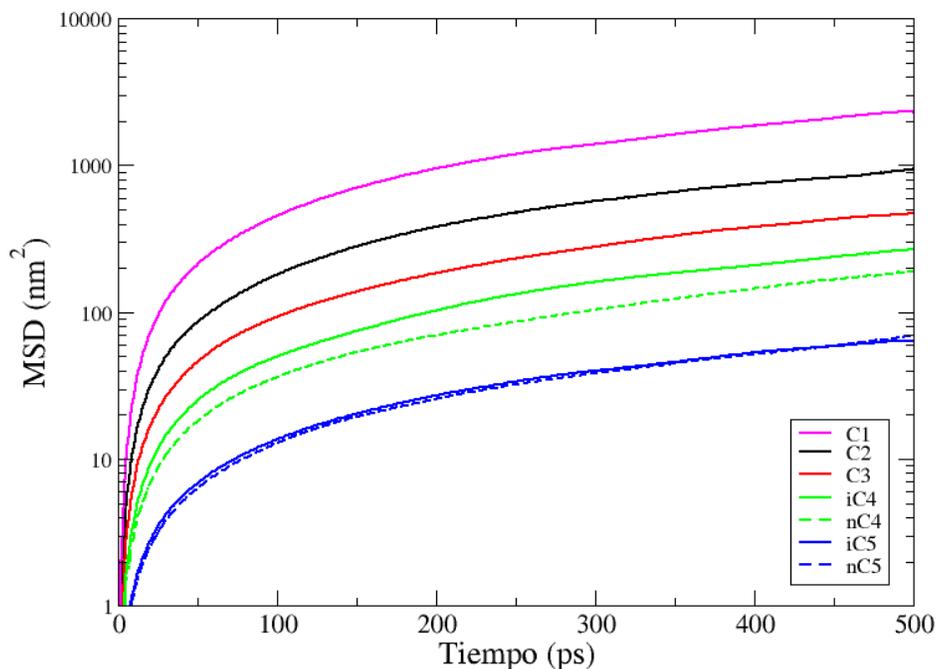


Figura 5.23: Desplazamiento cuadrático medio (MDS) contra el tiempo correspondientes a la difusión de diferentes sistemas de hidrocarburos, la línea rosa corresponde al MSD del metano, la línea negra es el caso del etano, la línea roja es para el propano, el color verde es para el butano (sólida es para el isobutano y punteada para el n-butano) y el color azul es para indicar el MSD del pentano (línea sólida es para el isopentano y punteada para el n-pentano).

El desplazamiento cuadrático medio es la medida más común de la difusión de partículas con movimiento aleatorio. Este cálculo es el que permite obtener el coeficiente de difusión

de las moléculas.

A continuación se presentan el MSD de las moléculas, para los diferentes casos evaluados, solo para tener una visión más clara de cómo al aumentar el tamaño de la molécula (de manera general y para el caso de estos hidrocarburos), disminuye la capacidad de difundir de la partícula.

En la Figura 5.23 se presentan la gráficas de la MSD para los primeros resultados del metano (línea rosa), etano (línea negra), propano (línea roja), isobutano (línea verde), n-butano (línea punteada verde), isopentano (línea azul) y n-pentano (línea punteada azul). El orden en el que encontramos las curvas es metano>etano>propano>isobutano>n-butano>isopentano >isopentano>n-pentano. Vemos que el comportamiento entre el isopentano y n-pentano es prácticamente el mismo. Isobutano presenta una mayor movilidad que el n-butano. Y para estos casos se ve claramente cómo al aumentar el número de carbonos en la cadena disminuye la difusión de las moléculas (dato que se vio en el coeficiente de difusión).

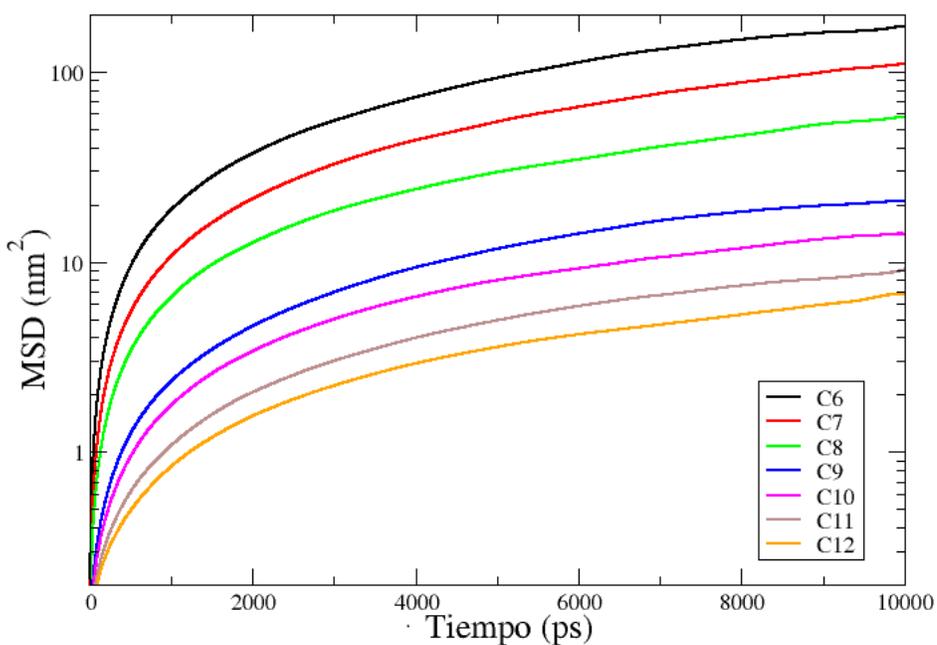


Figura 5.24: Desplazamiento cuadrático medio (MDS) contra el tiempo correspondientes a la difusión de diferentes sistemas de hidrocarburos, la línea negra corresponde al MSD del hexano, la línea roja es el caso del heptano, la línea verde es para el octano, el color azul es para el nonano, rosa es el MSD del decano, café es del undecano y naranja del dodecano.

En la Figura 5.24 se muestran el MSD de los hidrocarburos, hexano (línea negra), heptano (línea roja), octano (línea verde), nonano (línea azul), decano (línea rosa), undecano (línea café) y dodecano (línea naranja). El comportamiento del MSD para estos casos es regular, conforme aumenta el tamaño de la cadena disminuye su capacidad de difundir en el sistema.

En la Figura 5.25 tenemos la gráfica del MSD del tridecano hasta el octadecano. Presentan un comportamiento no tan ordenado como los casos anteriores y el orden de magnitud

es menor. Para estos casos tenemos un MSD en el siguiente orden hexadecano >tetradecano >tridecano >heptadecano >pentadecano >octadecano el comportamiento del MSD del heptadecano y octadecano indican que faltó más tiempo para la simulación, lo cual coincide con lo que se esperaba debido a la configuración del sistema (la cual se podía ver que los sistemas estaban demasiado ordenados para simular un adecuado comportamiento). En la Figuras 5.25 tenemos la gráfica del MSD del nonadecano hasta el tetracosano. El orden de las curvas es el siguiente tricoseno>heneicosano>eicosano>tetracosano=nonadecano>docosano, al sistema de moléculas de docosano le faltó tiempo a la simulación.

En la Figura 5.27 se presentan las curvas de MSD desde el pentacosano hasta el triacontano. Estos últimos 6 sistemas son los que presentaron una menor difusión, el orden de magnitud es menor a 1. El orden en el que se presentan las curvas de MSD es el siguiente pentacosano>hexacosano>nonacosano>octacosano>triacontano.

Se puede ver como va cambiando en órdenes de magnitud el MSD obtenido para los sistemas conforme aumenta el tamaño de la cadena. Como de forma general se presenta un menor desplazamiento conforme aumenta el tamaño de la cadena, también se aprecia como el orden del sistema afecta la calidad de la curva y e resultado.

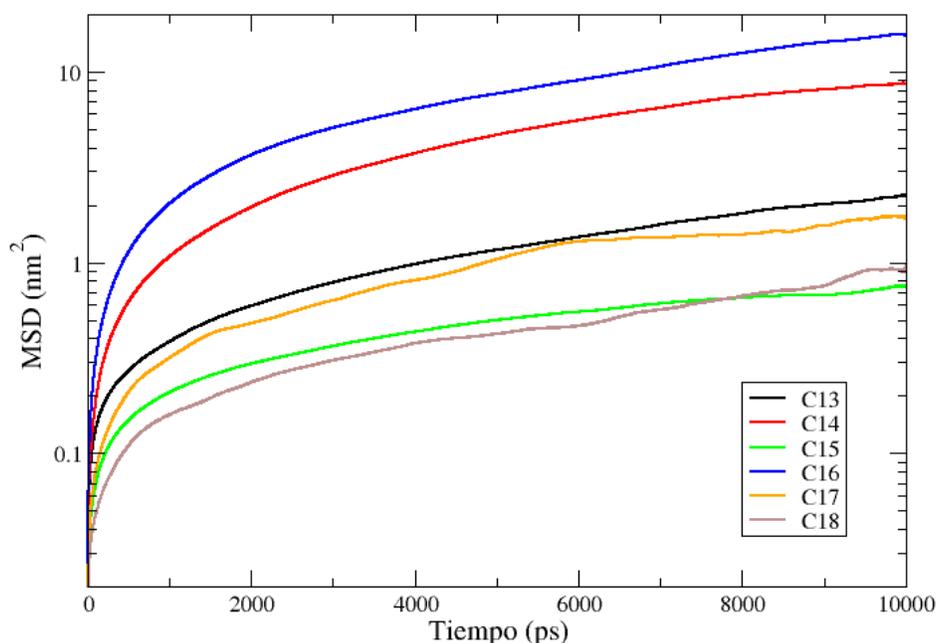


Figura 5.25: Desplazamiento cuadrático medio (MDS) contra el tiempo correspondientes a la difusión de diferentes sistemas de hidrocarburos, la línea azul indica el MSD del tridecano, rojo tetradecano, verde pentadecano, azul hexadecano, naranja heptadecano y café para el tetracosano.

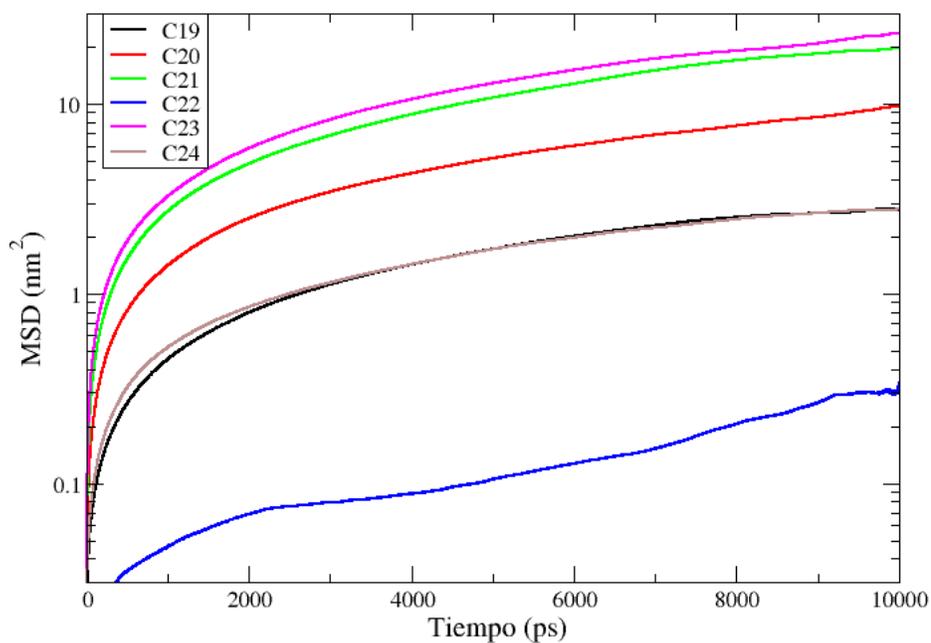


Figura 5.26: MSD contra el tiempo correspondientes a pentacosano (línea negra) nonadecano, la línea roja es el caso del eicosano, heneicosano (línea verde), docosano (línea azul), tricosano (línea rosa), undecano (línea cafe) y dodecano (línea naranja).

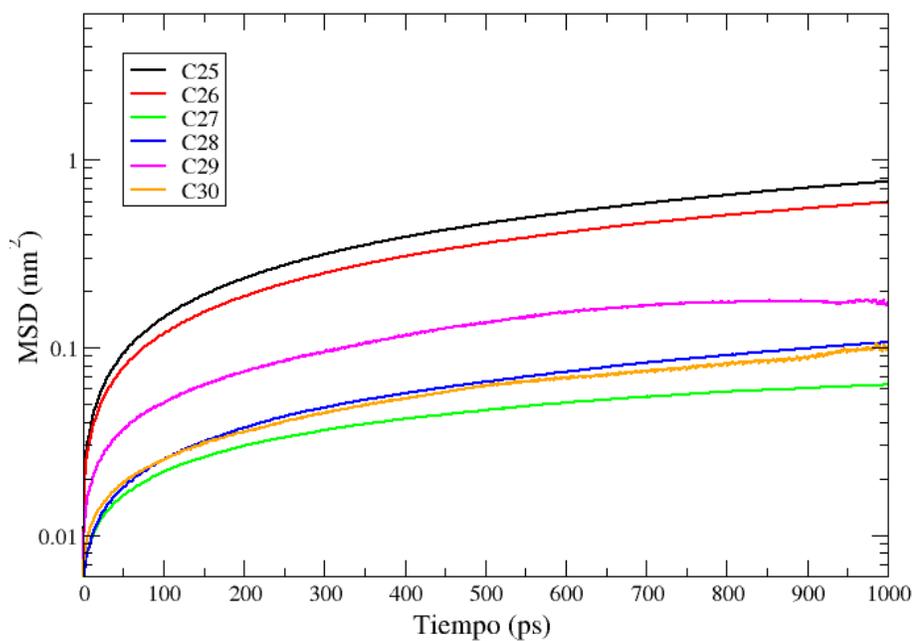


Figura 5.27: MSD contra el tiempo correspondientes a pentacosano (línea negra), hexacosano (línea roja), heptacosano (línea verde), octacosano (línea azul), nonacosano (línea rosa) y triacontano (línea naranja).

## Coeficiente de difusión

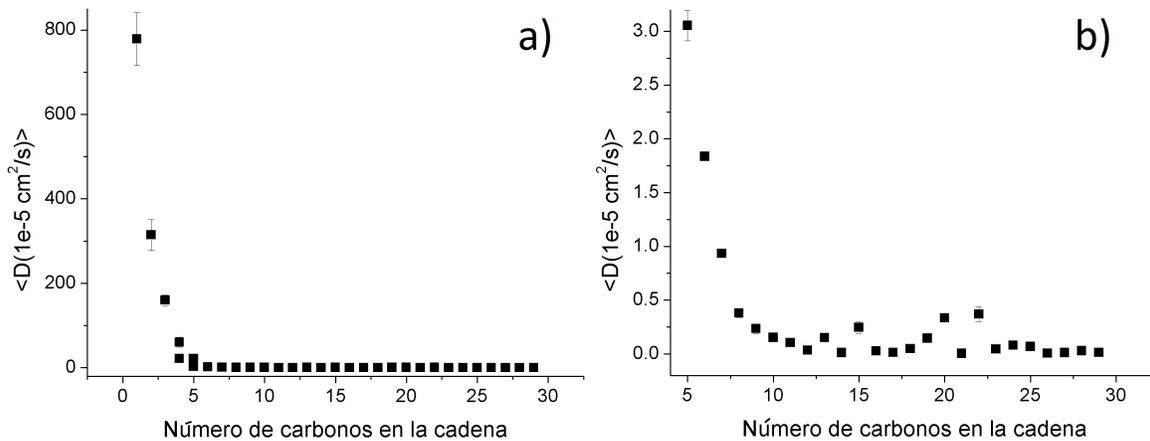


Figura 5.28: Coeficiente de difusión contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo. En la gráfica de la izquierda (a) se presentan los valores para todos los casos y en la gráfica de la derecha se vuelven a presentar los valores resultantes desde el n-pentano hasta el triacontano (b).

Para tener una mejor descripción de la forma en la que se mueven las moléculas del sistema, y ver con mayor detenimiento la fluidez del mismo se evaluó el coeficiente de difusión, el coeficiente de difusión es un valor que representa la facilidad con que cada soluto en particular se mueve en un disolvente determinado, sin embargo hay que recordar que para estos sistemas el coeficiente de difusión indica la fluidez de las moléculas sobre moléculas del mismo tipo (lo cual es lo presente en el sistema). En la Figura 5.28 se presentan los valores de los coeficiente de difusión contra el número de carbonos en la cadena. Se presentan dos gráficas, estas indican los valores de la misma propiedad pero a diferentes escalas, la primera gráfica muestra los coeficientes de difusión de todos los sistemas, para los casos de los hidrocarburos de menor tamaño obtenemos valores varias órdenes de magnitud más grande que para el resto de los sistemas, por lo que se aprecia como si el resto de los sistemas a partir de hexano fueran prácticamente cero, en la segunda gráfica se presentan nuevamente los coeficientes de difusión pero del n-butano en adelante, se puede percibir como del n-butano al dodecano, el coeficiente de difusión va disminuyendo drásticamente, a partir del tridecano al triacontano el coeficiente de difusión varía entre 0 y  $0,5 \times 10^{-5} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ . Esto nos refuerza los datos que habíamos estado obteniendo hasta ahora de como para el caso de metano, etano, propano y butano las moléculas difunden rápidamente ya que tenemos esta disponibilidad por parte del sistema (ya que es prácticamente un gas), hexano al tridecano presentamos difusión pero mucho más despacio (lo cual nos da la idea de un líquido) y en adelante empieza a ser muy despacio la difusión, y prácticamente cero (lo que nos haría referencia a un sólido o "líquido super-viscoso").

## 5.2.4. Propiedades macroscópicas.

### Densidad

Uno de los parámetros de principal interés a evaluar en esta clase de sistemas es la densidad, el valor de densidad presentado es aquel obtenido al evaluar el sistema con la subpaquete “density” de GROMACS. En la Figura 5.29 se presenta el promedio de la densidad obtenida en las simulaciones a 55°C y 34 atm (cuadros negros) y los círculos rojos indican los valores experimentales reportados para los casos a condiciones estándar.

Los valores obtenidos de la densidad para el caso de las simulaciones es bastante cercano a los valores reportados experimentalmente, hay que hacer hincapié en el hecho de que los valores reportados son a condiciones estándar lo cual es a mucho menor presión y temperatura, en comparación a las condiciones en las que se realizaron las simulaciones, como se esperaba y se estaba planeando conforme se fueron abordando las secciones anteriores, al aumenta el tamaño de la cadena del hidrocarburo aumenta la densidad del sistema.

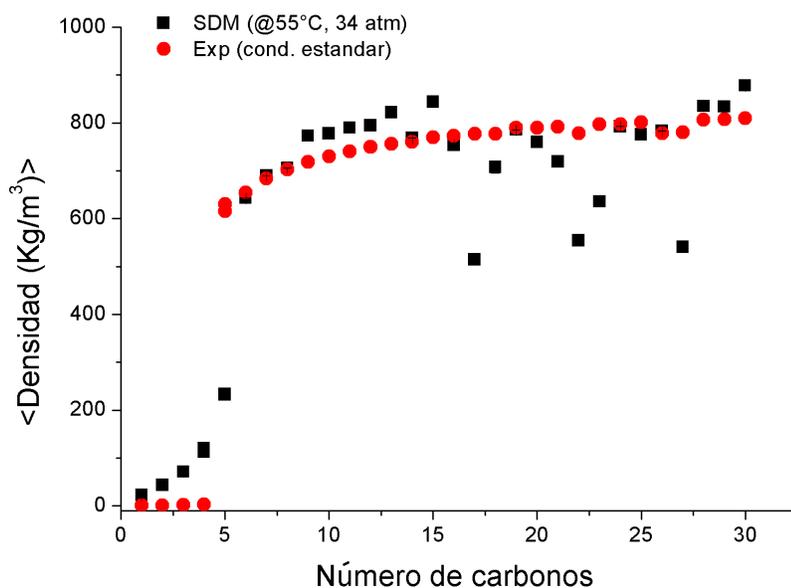


Figura 5.29: Promedio de la densidad contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo. Los cuadros negros indican los valores obtenidos en las simulaciones a las condiciones de yacimiento (34 atm, 55°C) y los círculos rojos son los valores reportados experimentalmente a condiciones estándar.

### Viscosidad dinámica

a estando en materia, hablando de cómo aumenta la dificultad de la difusión de las moléculas conforme aumenta el tamaño de la cadena del hidrocarburo, se procedió a calcular también la viscosidad dinámica de los sistemas. Recordemos que la viscosidad dinámica es la relación del esfuerzo o tensión local en un fluido en movimiento con la velocidad de deformación de

las partículas fluidas. Una forma simple de ver la viscosidad de un fluido es como la resistencia a que las distintas láminas deslicen entre sí.

En la Figura 5.30 se muestra el promedio de la viscosidad dinámica (el cual se obtiene de la viscosidad a lo largo de la trayectoria) contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo. Se puede ver como la viscosidad de los sistemas aumentan conforme aumenta el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo. Este aumento en la viscosidad no se presenta de forma lineal. No se hace una comparación directa a datos experimentales debido a 1) las condiciones establecidas en el sistema y 2) a que el valor obtenido es al promedio de la viscosidad obtenida a lo largo de la simulación, este valor tiene a ir en aumento conforme avanza la simulación, se necesitarán tener simulaciones más largas para obtener un valor más estable, por lo que el promedio tendría una discrepancia muy grande con los valores reportadas y 3) la forma en la que se obtiene el dato, para medir la viscosidad experimentalmente se consideran muchos parámetros que pueden intervenir en la medición.

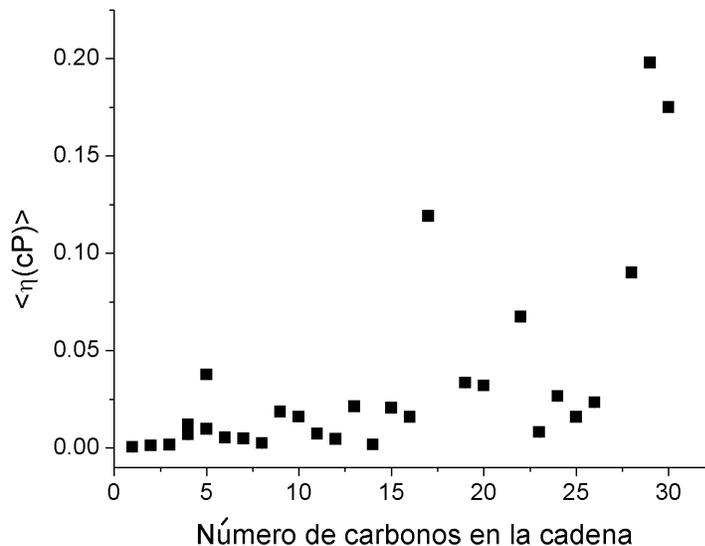


Figura 5.30: Promedio de la viscosidad dinámica contra el número de carbonos en la cadena del hidrocarburo.

## 5.2.5. Distribución espacial de las moléculas en el sistema.

### Función de distribución radial.

La función de distribución radial (RDF) es un parámetro que sirve para describir la variación de la densidad como función de la distancia medida desde una partícula de referencia. Debido a que tenemos 34 sistemas diferentes, y el comportamiento de la RDF es bastante similar entre ciertos sistemas, se seleccionaron solo unos pocos casos, para ejemplificar el comportamiento que se obtienen también en el resto de los sistemas.

En la Figura 5.31 se muestra la RDF de los sistemas: 1) metano (línea sólida negra), 2) tridecano (línea sólida roja), 4) ecosano (línea sólida azul) y 5) heptacosano (línea sólida verde).

Para el caso del RDF del metano se presenta un comportamiento similar al reportado para el RDF para gases, la cual es solo una línea horizontal que se va a uno, esto debido a que los gases no presentan un acomodo particular en las partículas, al contrario uno no esperaría encontrar partículas cercas unas de otras, y simplemente se va a uno como toda probabilidad (recordemos que la RDF es la probabilidad de encontrar partículas alrededor de otra). La RDF del tridecano tenemos un comportamiento similar al que se esperaría para líquidos, picos no del todo definidos y la  $g(r)$  rápidamente se va a uno. La RFD del ecosano presenta picos más definido, lo que nos indica una distribución más ordenada en el sistema, lo cual se podría relacionar con la viscosidad del fluido y por último el caso del heptacosano, el RDF de este sistema presenta picos definidos y agudos, esto se le puede atribuir más al caso de sólidos, como vimos estos sistemas son demasiado viscosos por lo que no se presenta una gran movilidad de las moléculas y la distribución de las mismas se mantiene estable sin embargo no se comporta del todo como un solido (ya que en este caso las  $g(r)$  se comportan como los difractogramas).

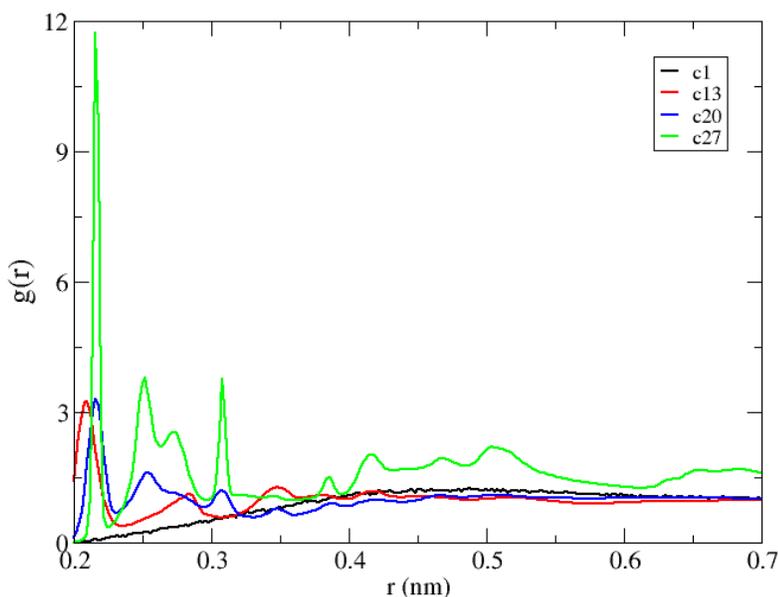


Figura 5.31: Función de distribución radial (RDF) contra la distancia, correspondientes a la difusión de diferentes sistemas de hidrocarburos, la línea negra corresponde al RDF del metano, línea roja el tridecano, línea azul el eicosano y el verde el heptacosano.

### 5.2.6. Resumen-Discusión

Para algunos casos sería recomendable repetir la simulación pero desde la construcción de la caja, sería más viable obtener un acomodo más errático de las moléculas al inicio, para obtener mejores condiciones al momento de realizar el cálculo de los parámetros, debido a que para algunas moléculas el acomodo se realizó de una forma ordenada y el sistema queda como si fueran plaquetas de moléculas unas sobre otras, algo que afecta la calidad y validez de dichos resultados.

Se obtuvieron densidades cercanas a las reportadas, y se vio como el aumento de del tamaño de la cadena de los hidrocarburos afecta desde la conformación que adoptan estos en el sistema hasta las propiedades del mismo, a mayor número de carbonos el sistema se empieza a comportar como un líquido muy viscoso, detalle que podemos apreciar tanto de los datos calculados del desplazamiento cuadrático medio, coeficiente de difusión, viscosidad e incluso con la función de distribución radial de los sistemas.

# Capítulo 6

## Resultados-Mezcla de hidrocarburos

En este capítulo se abordan los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas de la estratificación del aceite, recordemos que el sistema de interés se dividió en 4 sistemas tomando en cuenta los pesos moleculares de los hidrocarburos involucrados, estos sistemas quedan como: (1) gas, (2) hidrocarburos livianos, (3) hidrocarburos semi pesados y (3) hidrocarburos pesados. Debido a la falta de tiempo solo se alcanzaron a simular los primeros tres sistemas (los primeros 3). Los resultados de las simulaciones se dividieron por cada sección se aborda un sistema y sus respectivos homólogos con agua (25, 50 y 75 % de fracción molar de agua), en cada sección primero se presenta la visualización de los sistemas a un tiempo 'x' de la simulación, para tener una mejor idea de la distribución de las moléculas en el sistema, después se presentarán los resultados obtenidos para las evaluaciones de la estructura de los hidrocarburos involucrados (radio de giro, RMSD y superficie accesible al solvente), a continuación se presenta las propiedades relacionadas con la movilidad de las moléculas (MSD y coeficiente de difusión), únicamente para el caso del sistema de gas se presentan el estudio de la disposición espacial de las moléculas por medio de la función de la distribución radial.

En todas las simulaciones realizadas se utilizaron las moléculas trabajadas en las secciones anteriores y se llevaron los pasos descritos en la sección de metodología (minimización, equilibración y producción), y se corrieron a condiciones de yacimiento 55°C y a 34 atm, durante 20000 ps (20ns).

### 6.1. Gas.

Sistema formado por las moléculas de metano, etano, propano, butano (n e i), dióxido de carbono y ácido sulfhídrico. Se presenta la visualización de los sistemas a un tiempo 'x' de la simulación (Disposición de las moléculas en el sistema) esto para tener una mejor idea de la distribución de las moléculas en el sistema, después se presentarán los resultados obtenidos para las evaluaciones de la estructura de los hidrocarburos involucrados (radio de giro, RMSD y superficie accesible al solvente), a continuación se presenta las propiedades relacionadas con la movilidad de las moléculas (MSD y coeficiente de difusión), al final se

presenta el estudio de la disposición espacial de las moléculas por medio de los resultados de la función de la distribución radial.

### 6.1.1. Disposición de las moléculas en el sistema (Visualización).

La visualización de los sistemas se hizo por medio de VMD, la forma de ver las moléculas es con el radio de van der Waals.

En las Figuras 6.1, 6.2, 6.3, 6.4, 6.5 y 6.6 se muestra la visualización de los diferentes sistemas simulados para el caso del gas, recordemos que dicho sistema está formado por las moléculas de metano, etano, propano, butano (n e i), dióxido de carbono y ácido sulfhídrico. Para los diferentes casos se puede ver una disposición molecular para un comportamiento de gas comprimido, ya que es gas debido a que existe suficiente espacio entre las moléculas presentes, pero debido a las condiciones de presión en el que se está simulando se obtiene un gas comprimido.

En la Figura 6.1 se presenta a lado derecho el código de colores utilizado en la visualización de los diferentes sistemas, las moléculas de agua están coloreadas de gris-plata, el ácido sulfhídrico de rojo, el dióxido de carbono de negro, el metano de verde, el etano de azul, el propano de rosa, el n-butano de amarillo y el isobutano de naranja.

En la Figura 6.1 en el extremo izquierdo se muestra el sistema base (imagen que sirve de ejemplo de como se verá la visualización de las moléculas).

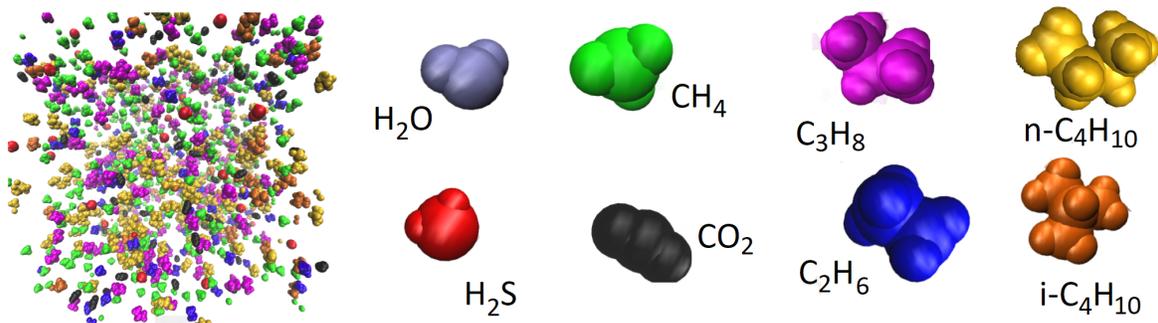


Figura 6.1: Visualización del sistema de gas por VMD, en el lado derecho se ve el código de colores utilizada para las diferentes moléculas.

En la Figura 6.2 se muestran la visualización de las moléculas del mismo sistema en el mismo tiempo, únicamente se seleccionó que se pudiera ver solo un tipo de ellas a la vez, esto sirve para ver la distribución de las mismas en el sistema. Se puede apreciar una distribución homogénea de las moléculas sin presentar algún acomodo preferente de las mismas, ni para el caso de los hidrocarburos, ni el dióxido de carbono o el ácido sulfhídrico.

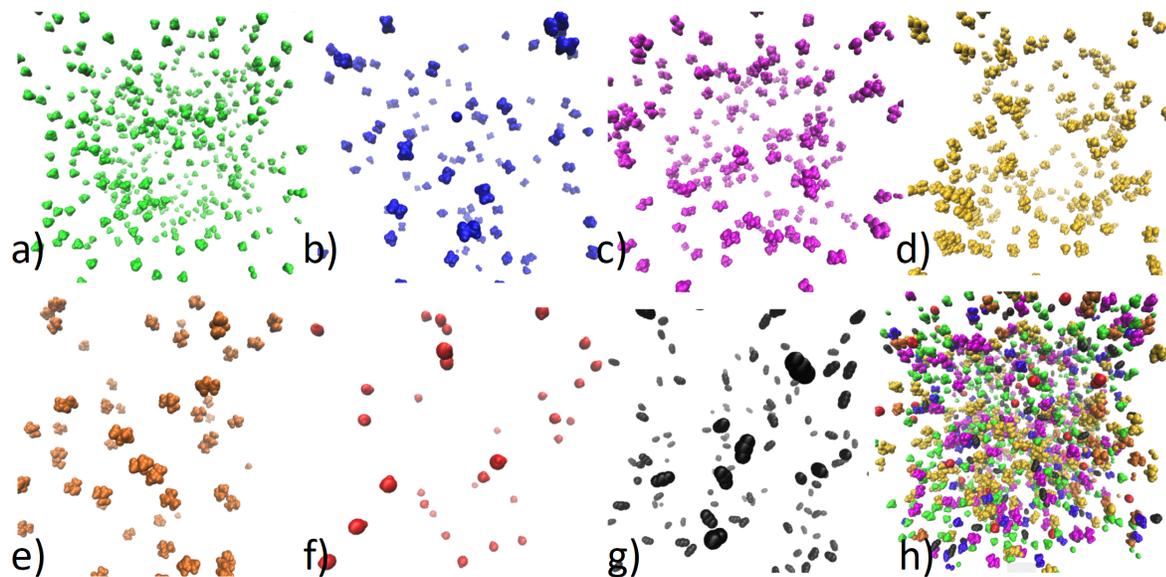


Figura 6.2: Visualización del sistema de gas. (a) todas las moléculas del sistema, (b) dióxido de carbono, (c) isobutano, (e) metano, (f) etano, (g) propano y (h) n-butano.

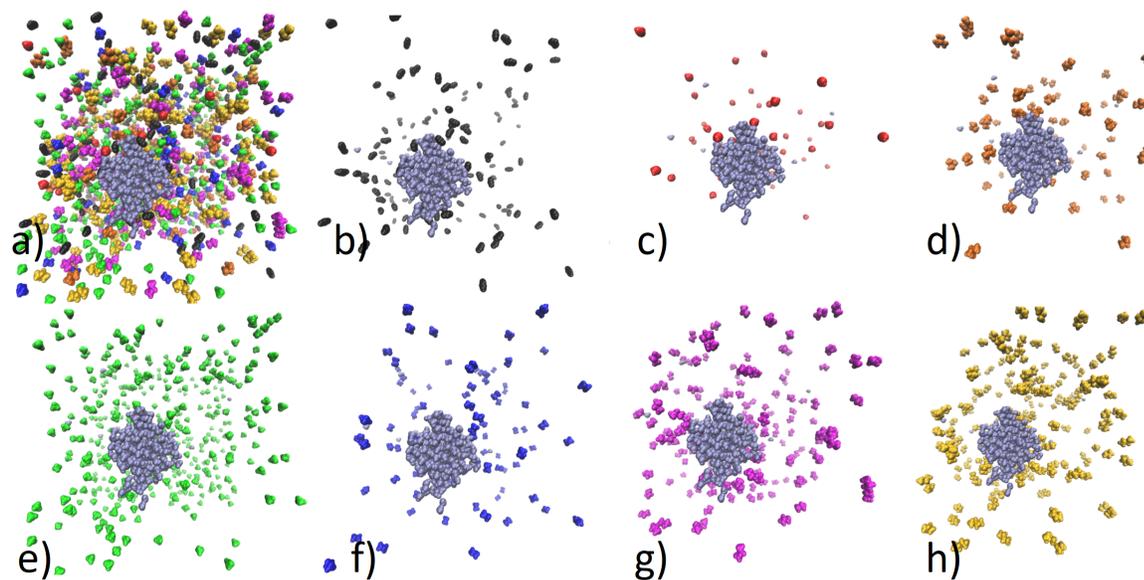


Figura 6.3: Visualización del sistema de gas con 25% de fracción molar por VMD, para el diferente acomodo de las moléculas en el sistema. (a) metano, (b) etano, (c) propano, (d) n-butano, (e) isobutano, (f) ácido sulfhídrico, (g) dióxido de carbono y (h) todas las moléculas del sistema.

En la Figura 6.3 se presenta las imágenes correspondientes al sistema del gas con 25 % fracción molar de agua, todas las imágenes son del mismo instante, se separan las moléculas para tener una mejor visualización del sistema. Se puede apreciar cómo las moléculas de agua forman una gota de agua (conglomerado de partículas de color gris-plata), en la imagen

(a) de la Figura 6.3 se puede apreciar la imagen con todas las moléculas presentes en el sistema, y en las siguientes las únicamente en el de las moléculas de agua y un específico tipo de molécula en el sistema.

En la Figura 6.4 se presentan acercamiento de la visualización del sistema para dos casos específicos, en la imagen de la izquierda se presentan las moléculas de agua (color gris-plata) y las moléculas de n-butano (color amarillo-metálico), de todas las moléculas presentes en el sistema estas fueron las que mostraron una mayor probabilidad de estar alrededor del aglomerado de las moléculas de agua. En la imagen de la derecha se presenta el aglomerado de las moléculas de agua (color gris-plata transparente) y las moléculas de ácido sulfhídrico (color rojo), esta imagen se presenta debido a que la única molécula que en la trayectoria de la simulación era capaz de entrar al aglomerado de las moléculas de agua fue el caso del ácido sulfhídrico, en la imagen se puede apreciar como hay varias moléculas de ácido sulfhídrico inmersas en la gota, estas no están atrapadas en la simulación se puede apreciar como estas entran y salen libremente.

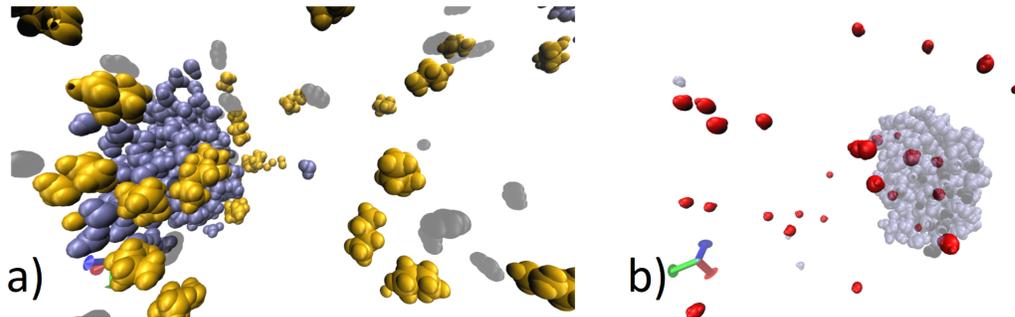


Figura 6.4: Visualización del sistema de gas con 25% de fracción molar por VMD. Acercamientos, (a) aglomerado de moléculas de agua rodeada por moléculas de n-butano y (b) aglomerado de moléculas de agua con moléculas de ácido sulfhídrico.

En la Figura 6.5 se muestran el acomodo de las diferentes moléculas para el caso del sistema de gas con 50% de fracción molar de agua. La visualización es en el mismo instante, se pueden apreciar en todas las imágenes las moléculas de agua (gris-plata) y se aprecia el acomodo del resto de las moléculas presentes alrededor de estas primeras. En (a) tenemos el caso de las moléculas de agua y el dióxido de carbono (moléculas negras), en (b) y (c) tenemos las moléculas de agua y las moléculas de ácido sulfhídrico (moléculas rojas) pero el segundo caso nos permite apreciar las moléculas de ácido sulfhídrico embebidas en la gota de agua, en (d) se muestra el metano (moléculas verdes) y las de agua, (e) etano (moléculas azules) y agua, (f) propano (moléculas rosas) y agua, (g) isobutano (moléculas naranjas), (h) n-butano (moléculas amarillas) y (i) se muestran todas las moléculas presentes en el sistema. El acomodo de las moléculas en este sistema es muy similar al caso con menor concentración de agua, también se puede apreciar como las únicas moléculas que pueden estar en la gota de agua son las del ácido sulfhídrico, y las moléculas de hidrocarburo que oscilan a distancias más cortas de la gota es el caso de las moléculas del n-butano.

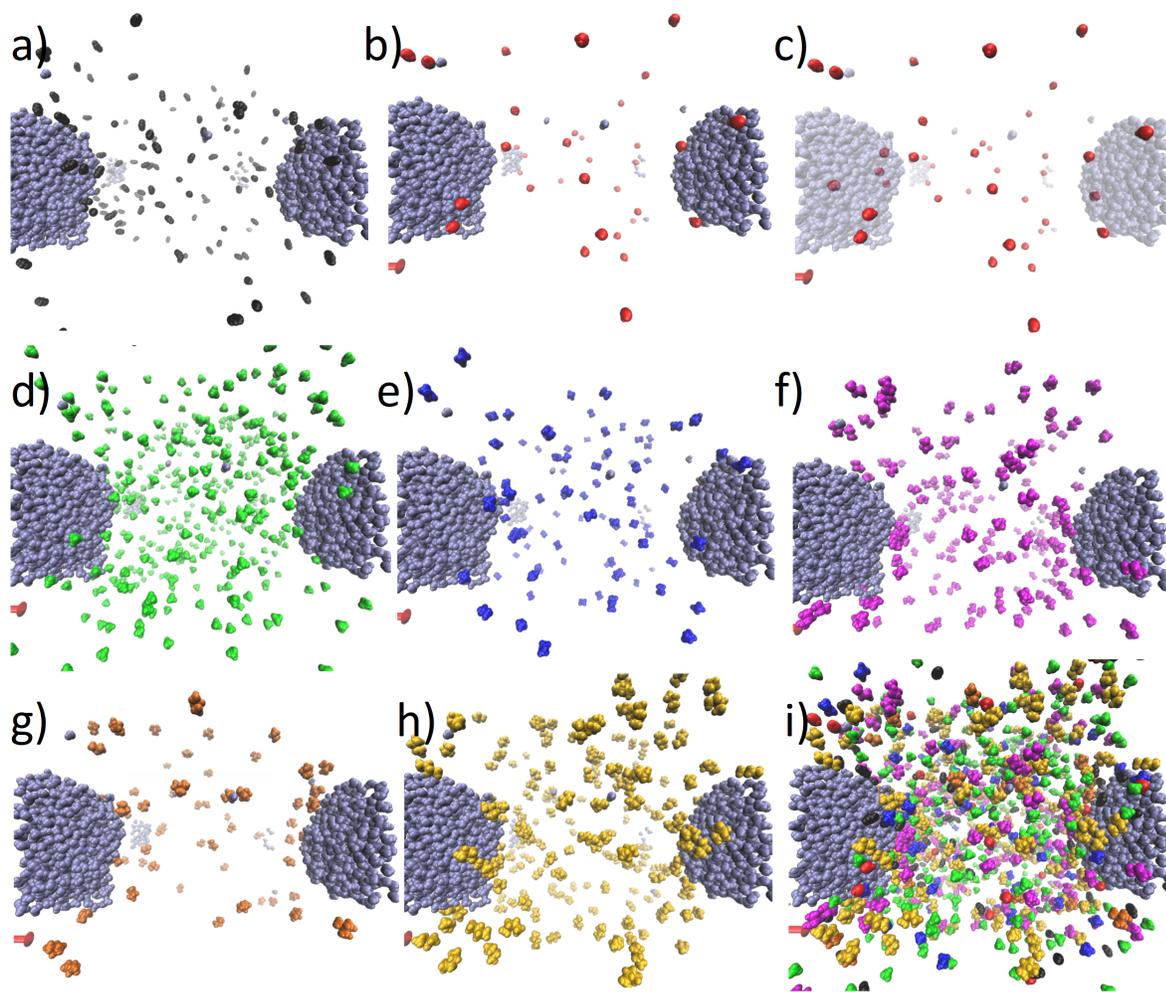


Figura 6.5: Visualización del sistema de gas con 50% de fracción molar por VMD. Moléculas de agua en color gris-plata y en cada cuadro se muestran específicas moléculas aparte de estas: en (a)  $CO_2$ , (b)  $H_2S$ , (c)  $H_2S$  con moléculas de agua transparentes, (d)  $CH_4$ , (e)  $C_2H_6$ , (f)  $C_3H_8$ , (g)  $i-C_4H_{10}$ , (h)  $n-C_4H_{10}$  y (i) todas las moléculas presentes en el sistema.

En la Figura 6.6 se presenta la visualización de la disposición de las diferentes moléculas para el caso del sistema de gas con 75% de fracción molar de agua. La visualización al mismo tiempo de la trayectoria, se puede apreciar en el panel las moléculas de agua (gris-plata). Se muestra en (a) moléculas de agua y el dióxido de carbono (moléculas negras), en (b) moléculas de agua y las moléculas de ácido sulfhídrico (moléculas rojas), (c) metano (moléculas verdes) y las de agua, (d) etano (moléculas azules) y agua, (e) propano (moléculas rosas) y agua, (f) isobutano (moléculas naranjas), (g) n-butano (moléculas amarillas), (h) moléculas de agua, n-butano (amarillas) y ácido sulfhídrico (rojas), e (i) se muestran todas las moléculas presentes en el sistema. La disposición de las moléculas en este sistema es muy similar a los casos previos, también se puede apreciar como las únicas moléculas que pueden estar en la gota de agua son las del ácido sulfhídrico, y las moléculas de hidrocarburo que oscilan a distancias más cortas de la gota es el caso de las moléculas del n-butano (imagen '(h)').

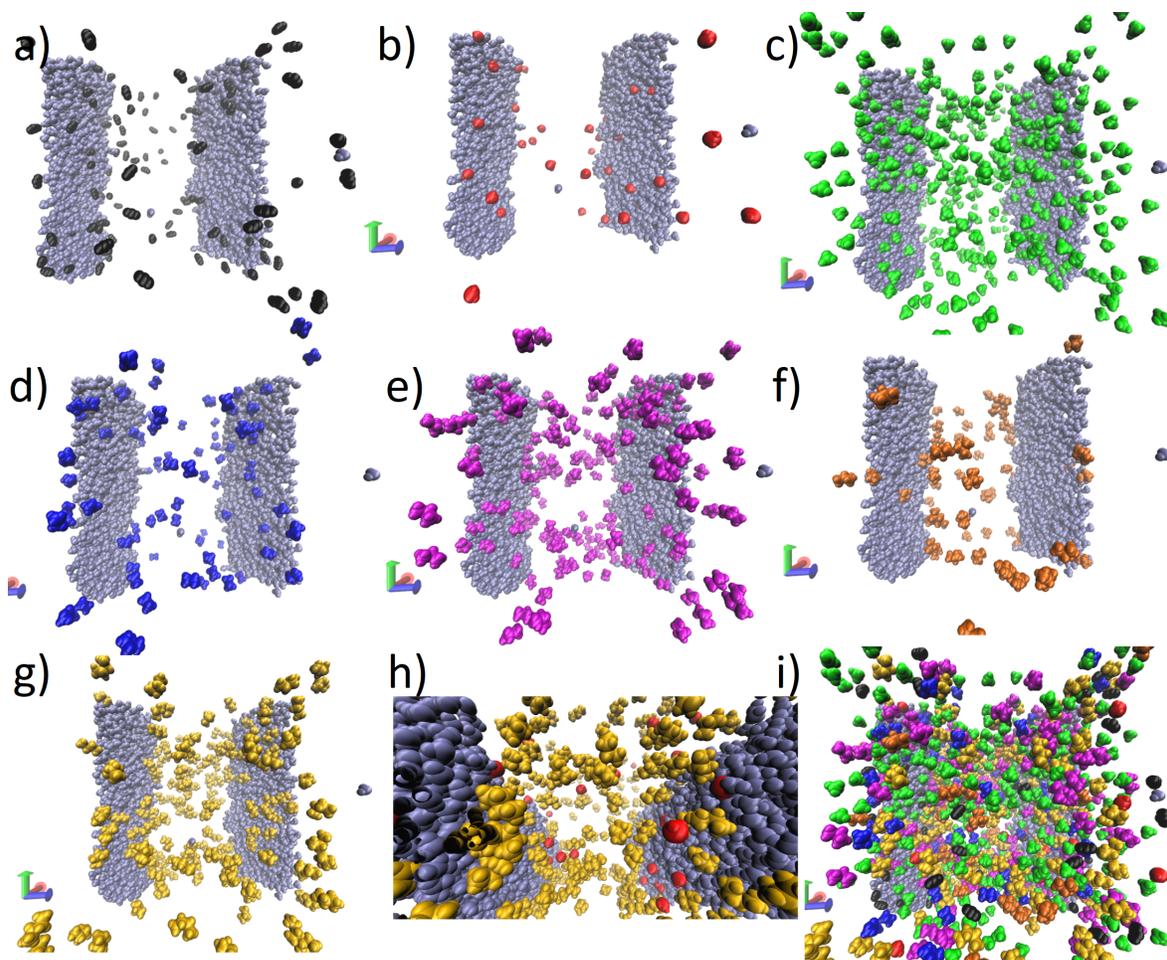


Figura 6.6: Visualización del sistema de gas con 50% de fracción molar por VMD. Moléculas de agua en color gris-plata y en cada cuadro se muestran específicas moléculas aparte de estas: en (a)  $CO_2$ , (b)  $H_2S$ , (c)  $CH_4$ , (d)  $C_2H_6$ , (e)  $C_3H_8$ , (f)  $i-C_4H_{10}$ , (g)  $n-C_4H_{10}$ , (h) moléculas de agua, n-butano y ácido sulfhídrico y (i) todas las moléculas presentes en el sistema.

De acuerdo a las disposiciones moleculares que se pueden apreciar, los diferentes sistemas se comportan como gases comprimidos, esto debido a las condiciones en las que se está llevando a cabo la simulación de los sistemas. Se puede apreciar en todos los casos como las moléculas de agua se conglomeran formando una sola gota en todos los casos, la única molécula que puede entrar y salir a esta aglomeración de moléculas de agua es el caso del ácido sulfhídrico, el hidrocarburo el cual su disposición nos indica que se encuentran más cerca sus moléculas a las moléculas de la superficie de la gota es el caso del n-butano, y el resto de las moléculas presentes su configuración no tiene una disposición preferente. También a nivel molecular se observó que las moléculas tienen una gran posibilidad en las conformaciones que estas pueden adoptar.

## 6.1.2. Propiedades estructurales de las moléculas.

### Radio de giro

Recordemos que el radio de giro es un parámetro que describe la forma en la cual el área transversal o una distribución de masa se distribuye alrededor de su eje centroidal. En la Figura 6.7 se presenta el promedio del radio de giro de cada hidrocarburo presente en el gas contra la fracción molar de agua presente. Las diferentes moléculas presentes muestran un comportamiento similar en sus respectivos sistemas. En la gráfica se puede apreciar como el radio de giro de los hidrocarburos disminuye en comparación del que presentan en el sistema sin agua, y donde tiene una diferencia muy grande en los datos (en comparación con el resto de los sistemas) es para el caso del gas con 75% de fracción de agua. Se obtuvo un valor más grande en comparación con el radio de giro que se obtuvo en la evaluación de las moléculas (las cuales estaban en vacío) lo cual indica como la interacción de las moléculas entre las presentes en el sistema tiene un efecto en las disposiciones geométricas de las mismas.

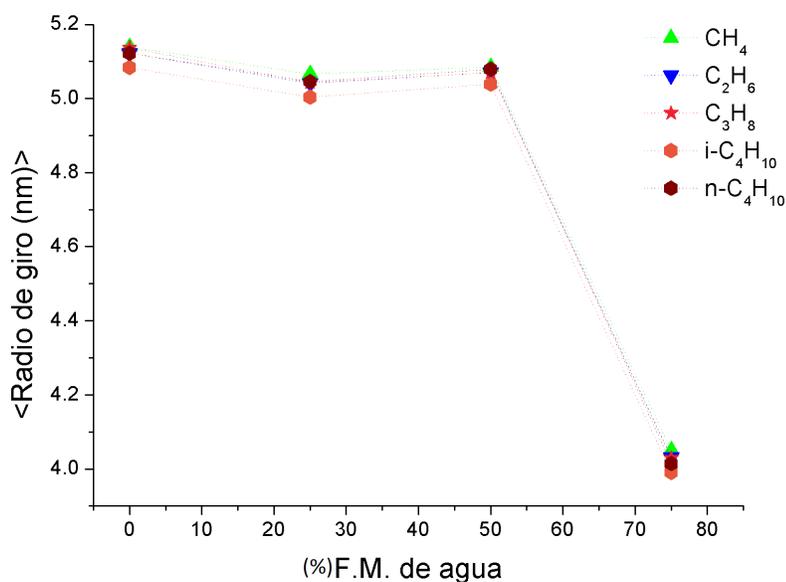


Figura 6.7: Promedio del radio de giro de los diferentes hidrocarburos en el sistema contra la fracción molar (F.M.) de agua presente.

### Desviación media raíz cuadrática (RMSD) de las posiciones atómicas

Otro parámetro que sirve para poder ver la disposición estructural de las moléculas presentes es la desviación media raíz cuadrática de las posiciones atómicas la cual es la medida de la distancia promedio entre los átomos.

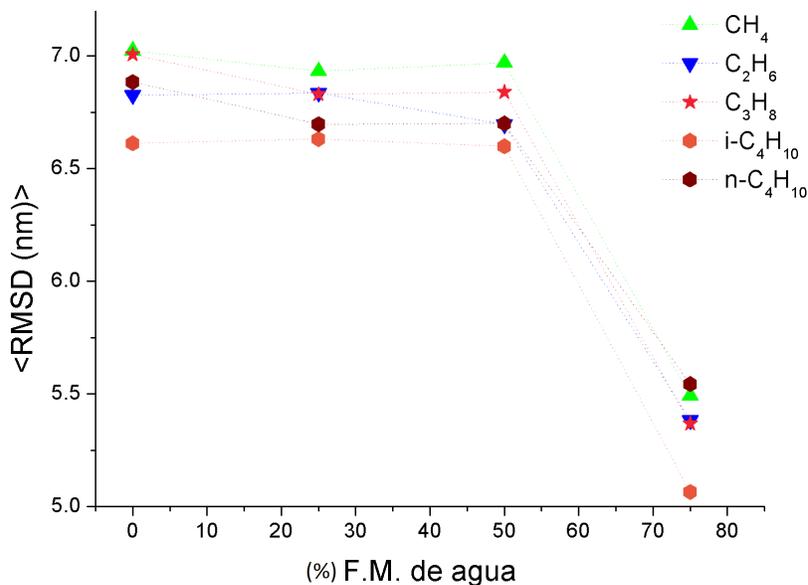


Figura 6.8: Promedio del radio de giro de los diferentes hidrocarburos en el sistema contra la fracción molar (F.M.) de agua presente.

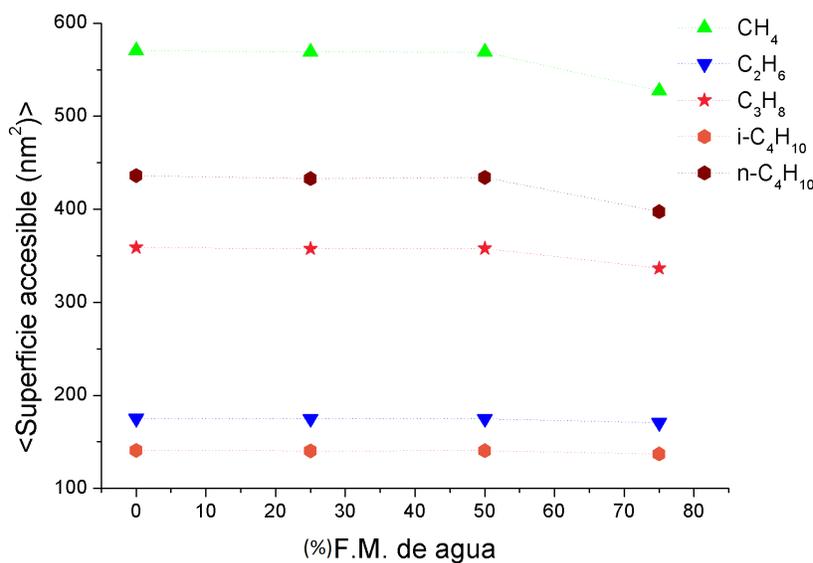


Figura 6.9: Promedio superficie accesible de los diferentes hidrocarburos en el sistema contra la fracción molar (F.M.) de agua presente.

En la Figura 6.8 se presenta la gráfica del promedio de la desviación media raíz cuadrática (RMSD) contra la fracción molar de agua presente en el sistema. En la gráfica se aprecia un comportamiento similar al del radio de giro, al aumentar la concentración de agua disminuye el RMSD y los valores que presentan una mayor diferencia es el caso del sistema a 75 % de agua, también se logra percibir cómo al aumentar el tamaño de la molécula disminuyó el

RMSD.

El comportamiento de cómo el RMSD disminuye al aumentar el tamaño de la molécula es curioso, debido a que uno esperaría que aumentara la distancia entre los átomos (ejemplo de las orillas), este comportamiento se puede atribuir a las condiciones mismas de la simulación, debido a la presión el gas se encuentra comprimido, esto genera que las moléculas opten por conformaciones plegadas lo que disminuye la distancia entre los átomos en las mismas.

### 6.1.3. Superficie accesible al solvente.

En la Figura 6.9 tenemos la gráfica de los resultados del promedio de la superficie accesible de los hidrocarburos contra la concentración de agua presente. El comportamiento de esta propiedad no presenta una linealidad o relación con el tamaño de los hidrocarburos. Encontramos el siguiente orden de los datos (de mayor a menor) metano>n-butano>propano>etano>isobutano.

### 6.1.4. Propiedades relacionadas con la movilidad de las moléculas.

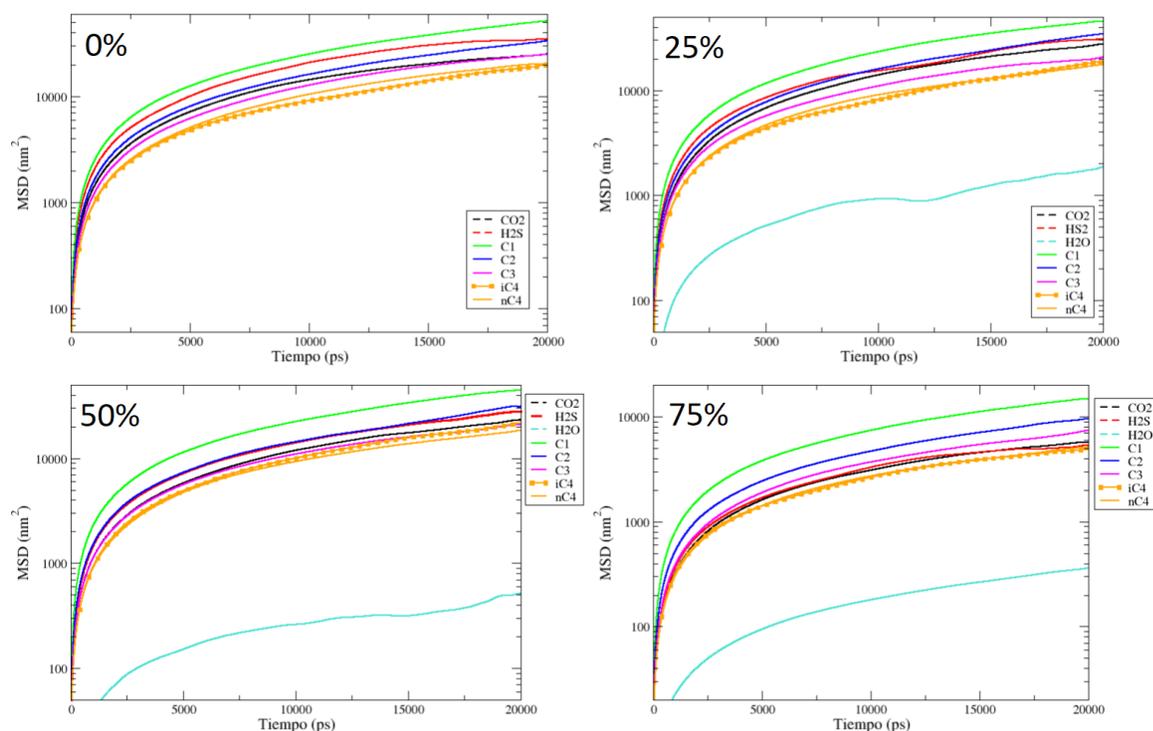


Figura 6.10: Desplazamiento cuadrático medio (MSD) contra el tiempo, de cada molécula presente en los diferentes sistemas. El porcentaje de fracción molar de agua correspondiente se encuentra indicado en el número de la esquina superior izquierda.

### 6.1.5. Coeficiente de difusión

El coeficiente de difusión es un valor que representa la facilidad con que cada soluto en particular se mueve en un disolvente determinado. Para esta propiedad se calculó el desplazamiento cuadrático medio (MSD) contra el tiempo de cada una de las moléculas para los 4 sistemas y a partir de este se obtuvo el coeficiente de difusión.

En las Figuras 6.10 se presenta el desplazamiento cuadrático medio de las moléculas contra el tiempo, de todos los sistemas simulados de gas, y en la Figura 6.10 se muestra el MSD de las moléculas de agua para los diferentes porcentajes.

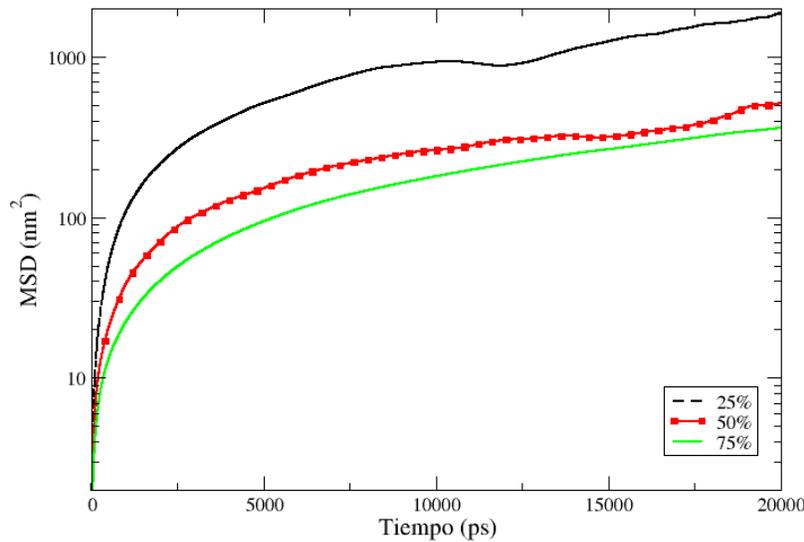


Figura 6.11: Desplazamiento cuadrático medio (MSD) contra el tiempo, de las moléculas de agua para cada sistema.

El comportamiento de difusión de las moléculas es similar en los diferentes casos, pero al aumentar la concentración de agua presente disminuye la diferencia entre los valores del MSD entre las moléculas. En estas gráficas el MSD del agua no inicia en cero (debido a la diferencia en los órdenes de magnitud de dicho valor contra el resto).

En la Figura 6.11 se presenta el MSD de las moléculas de agua en los sistemas, se puede apreciar cómo al aumentar la concentración de agua en el sistema disminuye la difusión de las moléculas en el sistema. msd-h2o

A partir de los datos del MSD se calculó el coeficiente de difusión de las moléculas. En la Figura 6.12 se presenta el coeficiente de difusión ( $D$ ) contra el porcentaje de fracción molar de agua presente.

En forma general el coeficiente de difusión disminuye conforme aumenta la concentración de agua. Para todos los casos la molécula que presenta mayor difusión es el metano, y en segundo orden el etano (a excepción del primer sistema, ya que en este la difusión del ácido sulfhídrico es mayor a este), después se encuentra el ácido sulfhídrico, e inmediatamente

el dióxido de carbono y propano, para los casos del n-butano e isobutano el coeficiente de difusión es muy similar, y la molécula que tarda más en difundir es la molécula de agua.

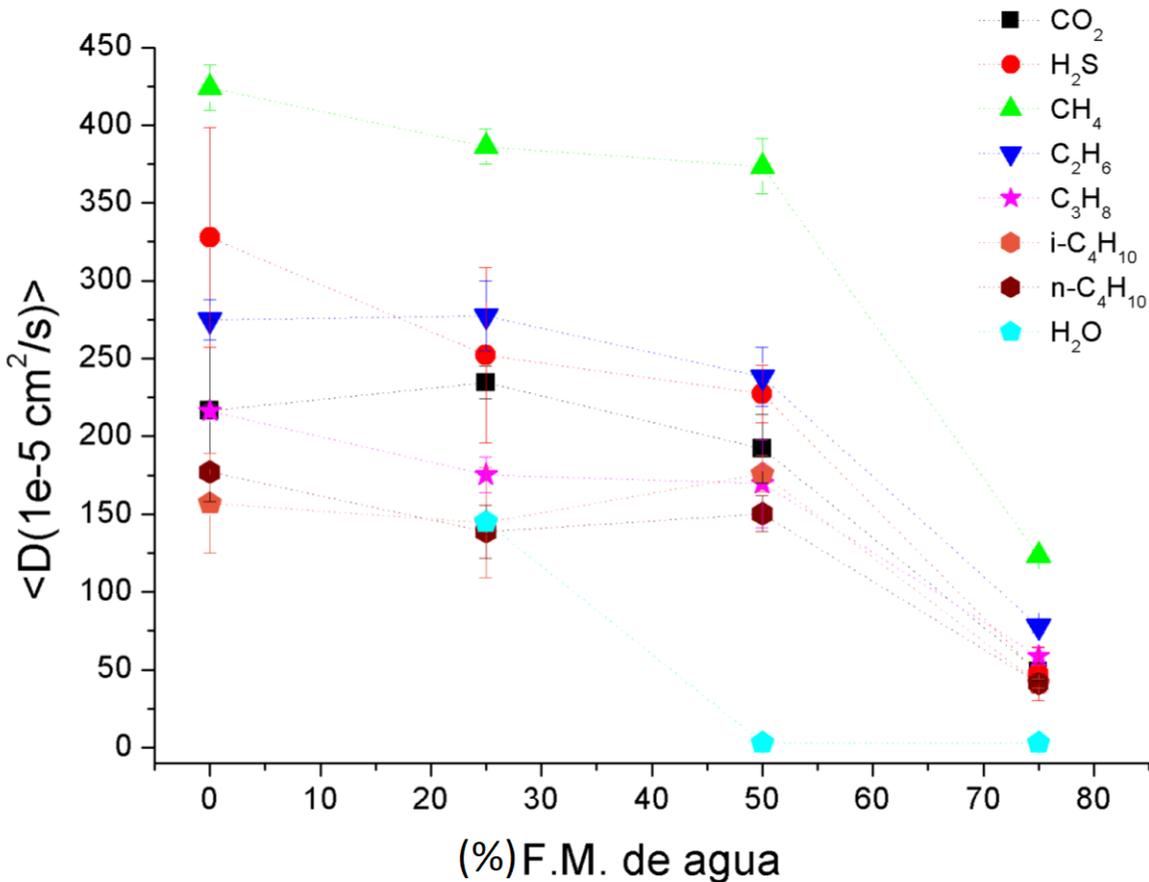


Figura 6.12: Coeficiente de difusión (D) de los diferentes hidrocarburos en el sistema contra la fracción molar (F.M.) de agua presente.

Este comportamiento de la difusión de las moléculas de agua en el sistema se puede atribuir a las propiedades e incompatibilidad de las mismas moléculas presentes. Siendo las moléculas por las cuales tendría que difundir el agua principalmente de hidrocarburos. Y presentamos valores del coeficiente de difusión elevados, debido al tipo de sistema con el que se está trabajando (a las condiciones de simulación es un gas comprimido pero sigue siendo gas).

### 6.1.6. Distribución espacial de las moléculas.

Para mejorar el conocimiento (y no solo contar con la visualización de los sistemas) sobre la disposición de las moléculas en los sistemas simulados, se procedió con el cálculo de la función de distribución radial ( $g(r)$ ). Recordemos que la función de distribución radial describe la variación de la densidad como función de la distancia medida desde una partícula de referencia.

Sin embargo ya que contamos con los datos de múltiples sistemas y múltiples moléculas, la función de la distribución radial con respecto la distancia para todos los sistemas y moléculas se encuentran en los Apéndices (Apéndice B), y en esta sección se graficaron los datos de la altura del primer pico de la  $g(r)$  y la distancia en la que se encontraba este en la gráfica de la  $g(r)$ , esto para facilitar su análisis e interpretación.

Hay que aclarar que todos los cálculos de la  $g(r)$  se hicieron tomando el centro de masa de la molécula como referencia.

Antes de abordar los resultados mostradas en las gráficas, recordemos la interpretación de la  $g(r)$  y por que es útil la información presentada (altura y distancia del primer pico). La función de distribución radial nos da información de cuál es la probabilidad de encontrar ciertas moléculas y a que distancias, tomando una en especifica de referencia. Entonces la altura nos habla de la probabilidad y esto se puede comparar entre las diferentes molécula presentes, y la distancia del pico nos dice a qué cantidad de nanómetros con respecto a la molécula de referencia podemos encontrar dichas moléculas. Entonces las siguientes gráficas nos indican el comportamiento de la distribución de las moléculas en el sistema alrededor de alguna en específico de referencia con respecto al porcentaje de fracción molar de agua en los diferentes sistemas.

Primero se presentan las gráficas de la distancia y el máximo del  $g(r)$  tomando de referencia las distintas moléculas presentes en los sistemas, en cada caso se muestran los datos correspondientes al agua, sin embargo al final de la sección se presentan como tal las  $g(r)$  tomando como el agua de referencia para el cálculo.

### Molécula de referencia: Dióxido de carbono

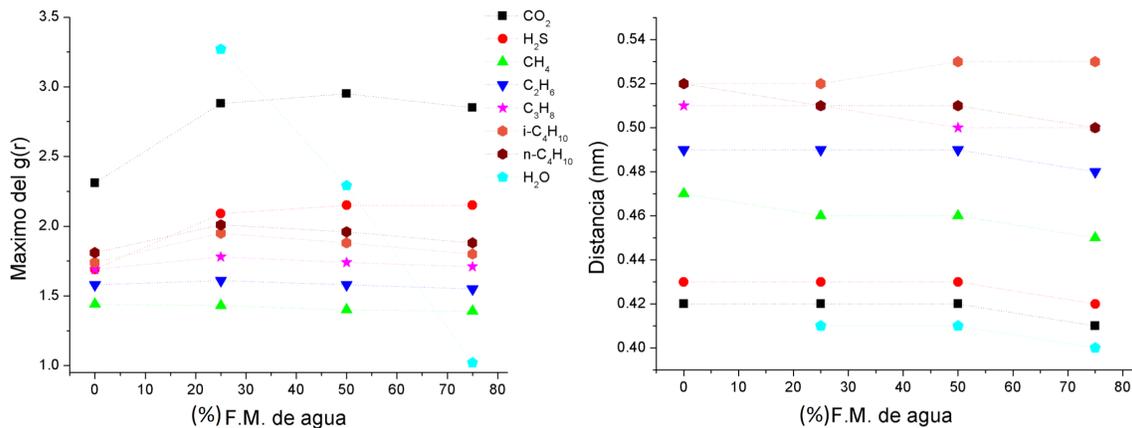


Figura 6.13: Máximo del  $g(r)$  y distancia ( $r$ ) de las moléculas en el sistema contra la fracción molar (F.M.) de agua presente. La  $g(r)$  se evaluó tomando el  $CO_2$  como referencia.

En la Figura 6.13 se muestra el máximo del  $gr(r)$  contra el porcentaje de fracción molar del agua presenta, y la distancia ( $r$ ) contra el porcentaje de fracción molar presente, tomando de referencia para el cálculo la molécula de dióxido de carbono. El comportamiento de la probabilidad de encontrar dióxido de carbono o ácido sulfhídrico aumenta al tener agua en

el sistema, pero la distancia en la que se encuentra dicha molécula no presenta diferencia significativa, el dióxido de carbono se presenta antes. Para las moléculas de metano, etano, propano, y butano no hay una diferencia entre la probabilidad de encontrarlas y la distancia, el máximo del  $g(r)$  aumenta con el tamaño del hidrocarburo y la distancia de encontrarla alrededor del dióxido de carbono disminuye. La molécula donde se observa un comportamiento más abrupto es el caso de la molécula de agua, esta probabilidad disminuye conforme aumentan la concentración de agua en el sistema, en la distancia no se observa una diferencia significativa.

### Molécula de referencia: Ácido sulfhídrico

En la Figura 6.14 se muestra el máximo del  $g(r)$  contra el porcentaje de fracción molar del agua presente, y la distancia ( $r$ ) contra el porcentaje de fracción molar presente, tomando de referencia para el cálculo la molécula de ácido sulfhídrico. La molécula con mayor probabilidad de encontrarse alrededor de las moléculas de ácido sulfhídrico son las moléculas de agua, y esta probabilidad disminuye conforme aumenta la concentración de agua. En segundo lugar tenemos dióxido de carbono, luego ácido sulfhídrico. La probabilidad de encontrar a los hidrocarburos es prácticamente la misma en todos los casos, aumenta muy ligeramente con la presencia de agua, y la distancia aumenta conforme aumenta el tamaño del hidrocarburo.

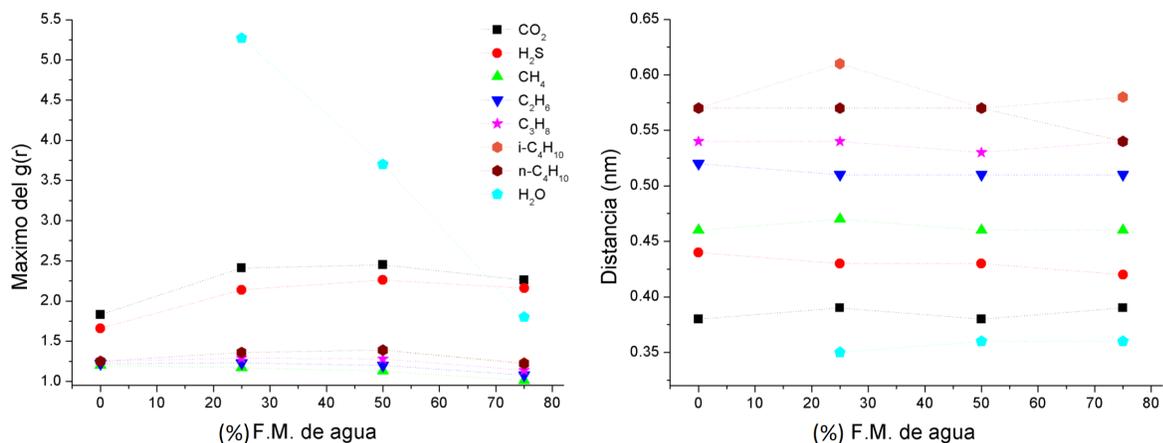


Figura 6.14: Máximo del  $g(r)$  y distancia ( $r$ ) de las moléculas en el sistema contra la fracción molar (F.M.) de agua presente. La  $g(r)$  se evaluó tomando el  $\text{H}_2\text{S}$  como referencia.

A continuación se muestran los resultados para los hidrocarburos, en estos casos no se presenta los resultados de las moléculas de agua alrededor de los respectivos hidrocarburos, debido a que se abordarán al final de la sección y al tipo de curva que presentaron.

## Molécula de referencia: Metano

En la Figura 6.15 se muestra el máximo del  $g(r)$  contra el porcentaje de fracción molar del agua presente, y la distancia ( $r$ ) contra el porcentaje de fracción molar presente, tomando de referencia para el cálculo la molécula de metano. La molécula con mayor probabilidad de encontrarse alrededor del metano es la del dióxido de carbono y es la que se encuentra a una menor distancia. La molécula con menor probabilidad de encontrarse alrededor del metano es el caso del  $H_2S$ , y dicha probabilidad disminuye con la concentración de agua en el sistema y la distancia en donde se puede encontrar es prácticamente la misma que la del metano. el caso de las moléculas de hidrocarburo presentan una probabilidad muy parecida (siendo menor para el caso del metano mismo), y estas aumentan considerablemente para en el sistema con 75 % de F.M. de agua; y la distancia para encontrar a estos va aumentando conforme aumenta el tamaño del hidrocarburo.

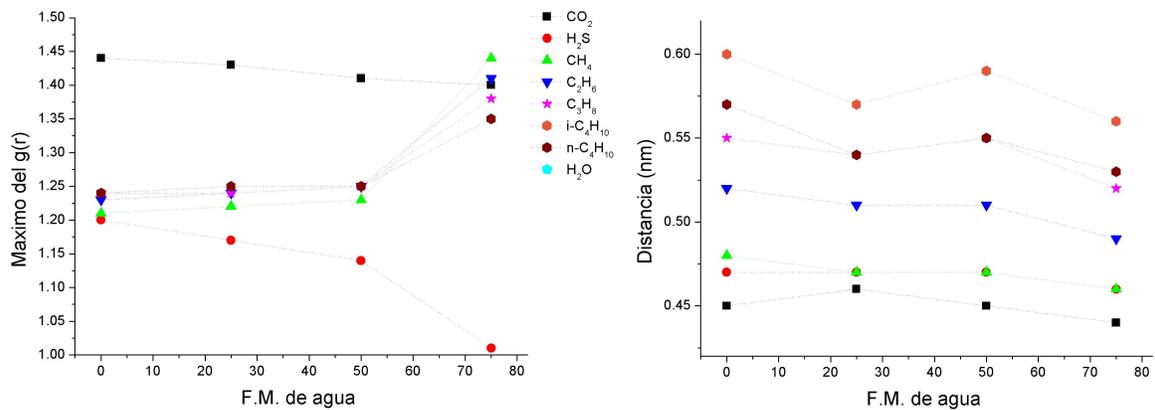


Figura 6.15: Máximo del  $g(r)$  y distancia ( $r$ ) de los hidrocarburos en el sistema contra la fracción molar (F.M.) de agua presente. La  $g(r)$  se evaluó tomando el  $CH_4$  como referencia.

## Molécula de referencia: Etano

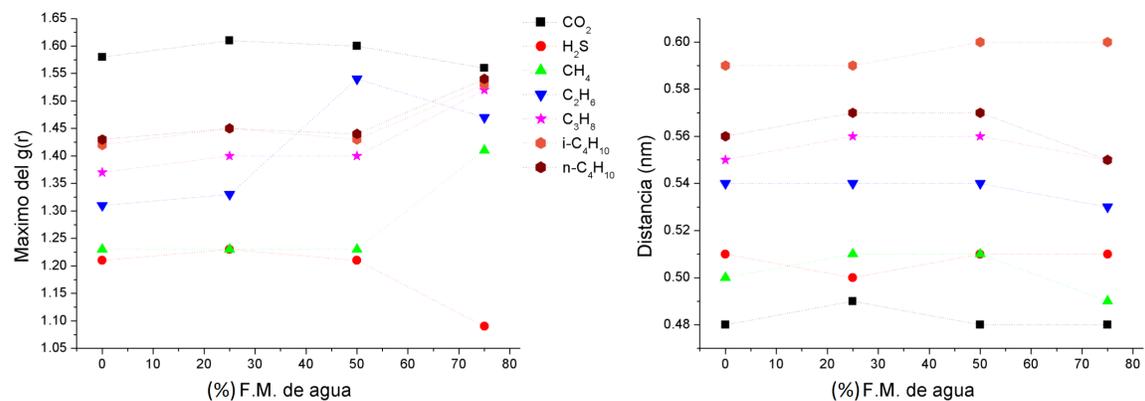


Figura 6.16: Máximo del  $g(r)$  y distancia ( $r$ ) de los hidrocarburos en el sistema contra la fracción molar (F.M.) de agua presente. La  $g(r)$  se evaluó tomando el  $C_2H_6$  como referencia.

En la Figura 6.16 se muestra el máximo del  $g(r)$  contra el porcentaje de fracción molar del agua presente, y la distancia ( $r$ ) contra el porcentaje de fracción molar presente, tomando de referencia para el cálculo la molécula de etano. La molécula que presenta una mayor probabilidad y se encuentra a una menor distancia es el caso nuevamente del dióxido de carbono. La molécula que se encuentra con menor probabilidad alrededor de las moléculas de etano es el caso del ácido sulfhídrico, pero la distancia es similar al caso del metano, también la probabilidad a excepción del sistema a 75 % ya que presenta un aumento en la probabilidad de encontrar al metano cerca. Para el caso del resto de los hidrocarburos (etano, propano y butano) la probabilidad aumenta con el tamaño de la cadena, a su vez como la distancia en la que se encuentran.

### Molécula de referencia: Propano

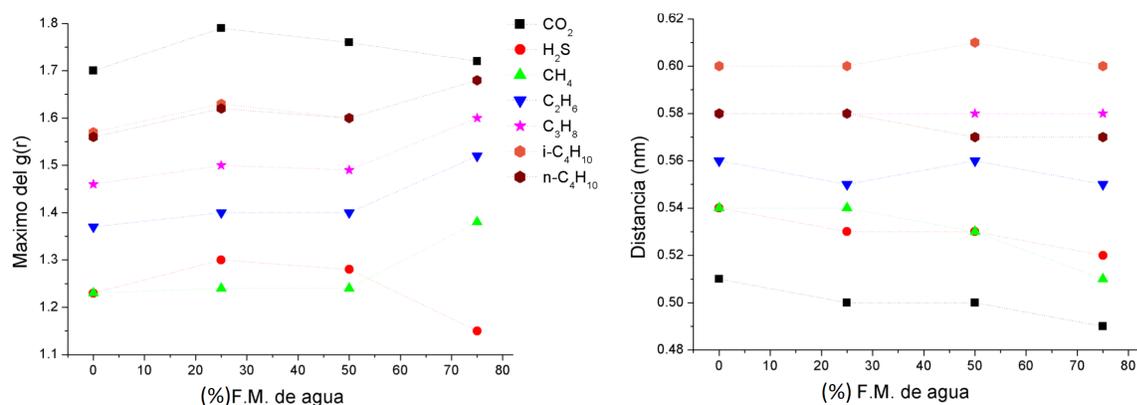


Figura 6.17: Máximo del  $g(r)$  y distancia ( $r$ ) de los hidrocarburos en el sistema contra la fracción molar (F.M.) de agua presente. La  $g(r)$  se evaluó tomando el  $C_3H_8$  como referencia.

En la Figura 6.17 se muestra el máximo del  $g(r)$  contra el porcentaje de fracción molar del agua presente, y la distancia ( $r$ ) contra el porcentaje de fracción molar presente, tomando de referencia para el cálculo la molécula de propano. La molécula que se encuentra a mayor probabilidad alrededor del propano y a una menor distancia de este es la del dióxido de carbono. Las moléculas de hidrocarburo (contando al mismo) a mayor tamaño es mayor la probabilidad de toparse con ella pero a una mayor distancia de la de referencia (que en este caso es el propano), y se puede ver como esta probabilidad disminuye al aumentar el porcentaje de agua presente en el sistema, pero las distancia se mantienen muy similares entre los sistemas. La probabilidad de encontrar moléculas de ácido sulfhídrico es de las menores (similar al caso del metano) y en el caso del sistema con 75 % de agua es la que presenta un menor valor.

## Molécula de referencia: Isobutano

En la Figura 6.18 se muestra el máximo del  $g(r)$  contra el porcentaje de fracción molar del agua presente, y la distancia ( $r$ ) contra el porcentaje de fracción molar presente, tomando de referencia para el cálculo la molécula de isobutano. La molécula que se encuentra a mayor probabilidad alrededor del isobutano y a una menor distancia (con una gran diferencia con el resto) de este es la del dióxido de carbono, esta probabilidad y distancia disminuyen conforme aumenta la concentración de agua en el sistema. Las moléculas de hidrocarburo (contando al mismo), a mayor tamaño es mayor la probabilidad de toparse con ella pero a una mayor distancia de la de referencia (que en este caso es el isobutano), y se puede ver como esta probabilidad disminuye al aumentar el porcentaje de agua presente en el sistema, pero las distancia se mantienen muy similares entre los sistemas, también en este caso la distancia para encontrar a los hidrocarburos son bastantes similares entre sí. La probabilidad de encontrar moléculas de ácido sulfhídrico la menor (comportamiento similar al caso del metano) y en el caso del sistema con 75% de agua es la que presenta un menor valor, pero muy cercana al caso del sistema sin agua, y la distancia en la que se encuentra esta molécula sólo es un poco antes al caso de los hidrocarburos.

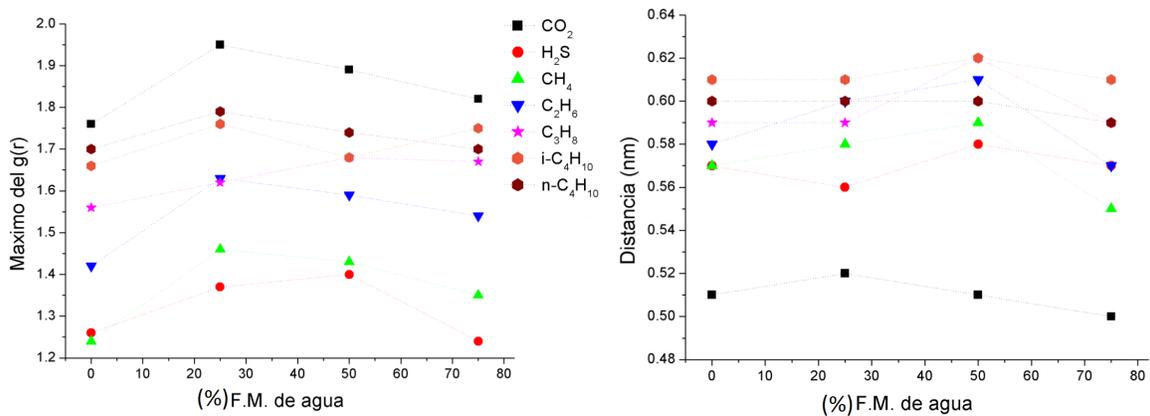


Figura 6.18: Máximo del  $g(r)$  y distancia ( $r$ ) de los hidrocarburos en el sistema contra la fracción molar (F.M.) de agua presente. La  $g(r)$  se evaluó tomando el  $i-C_4H_{10}$  como referencia.

## Molécula de referencia: n-Butano

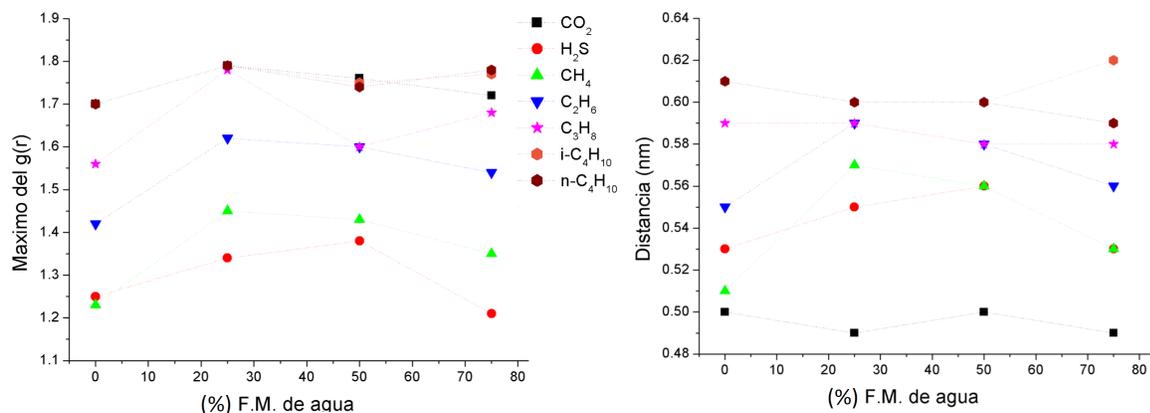


Figura 6.19: Máximo del  $g(r)$  y distancia ( $r$ ) de los hidrocarburos en el sistema contra la fracción molar (F.M.) de agua presente. La  $g(r)$  se evaluó tomando el  $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$  como referencia.

En la Figura 6.19 se muestra el máximo del  $g(r)$  contra el porcentaje de fracción molar del agua presente, y la distancia ( $r$ ) contra el porcentaje de fracción molar presente, tomando de referencia para el cálculo la molécula de n-butano. Para este caso encontramos con una probabilidad muy parecida las moléculas de dióxido de carbono, isobutano y n-butano, y se ve como esta disminuye sólo ligeramente al aumentar la concentración de agua, sin embargo en cuestión de distancias, la que se encuentra a menor distancia de la molécula e referencia es el caso del dióxido de carbono y a mayores el isobutano y n-butano (siendo muy similares entre sí). La probabilidad de encontrar al propano alrededor del n-butano oscila, por lo que no se ve un comportamiento o una tendencia en específico, pero la distancia permanece constante. El comportamiento del metano y al ácido sulfhídrico es similar pero el metano siempre muestra valores superiores en el máximo del  $g(r)$ , en ambos casos la probabilidad disminuye al aumentar la concentración de las moléculas de agua.

## Molécula de referencia: Agua

Se decidió mostrar las gráficas de  $g(r)$  para este caso debido al cambio del comportamiento de la función para los diferentes tipos de moléculas y el cambio en la intensidad de las mismas a las diferentes concentraciones. En las Figuras 6.20, 6.21 y 6.22 se muestra función de distribución radial ( $g(r)$ ) contra la distancia ( $r$ ) para las diferentes moléculas en los sistemas tomando como referencia la molécula de agua.

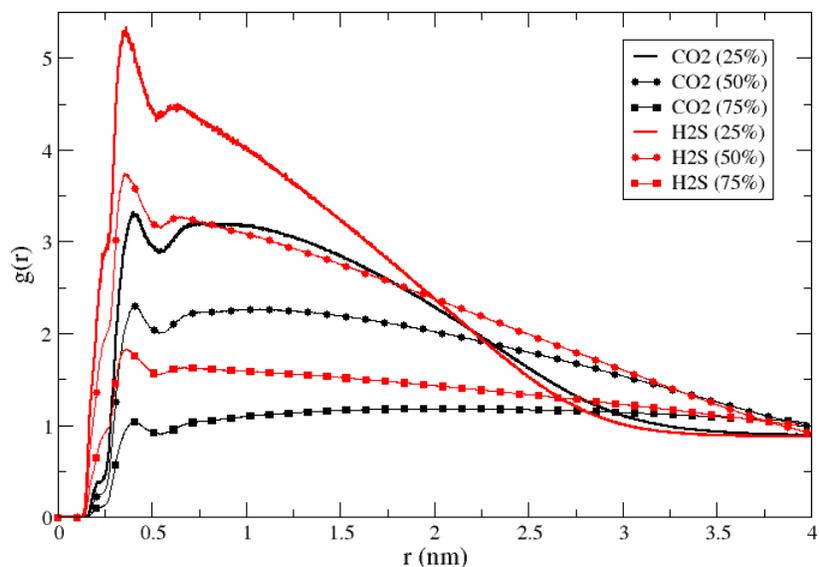


Figura 6.20: Función de distribución radial contra la distancia ( $r$ ) de  $CO_2$  (líneas negras) y el  $H_2S$  (líneas rojas) tomando de referencia el agua, para las diferentes concentraciones de agua: 25 % línea sólida, 50 % línea con círculos y 75 % línea con cuadros.

En la Figura 6.20 se tiene función de distribución radial ( $g(r)$ ) contra la distancia ( $r$ ) para  $CO_2$  (líneas negras) y el  $H_2S$  (líneas rojas) tomando como referencia la molécula de agua para las diferentes concentraciones de agua: 25 % línea sólida, 50 % línea con círculos y 75 % línea con cuadros. En forma general tenemos que a las diferentes concentraciones tenemos una mayor probabilidad de encontrar las moléculas de ácido sulfhídrico antes que el dióxido de carbono y también se encuentra a una menor distancia de la molécula de referencia. También se observa en ambos casos una segundo máximo local en la  $g(r)$ .

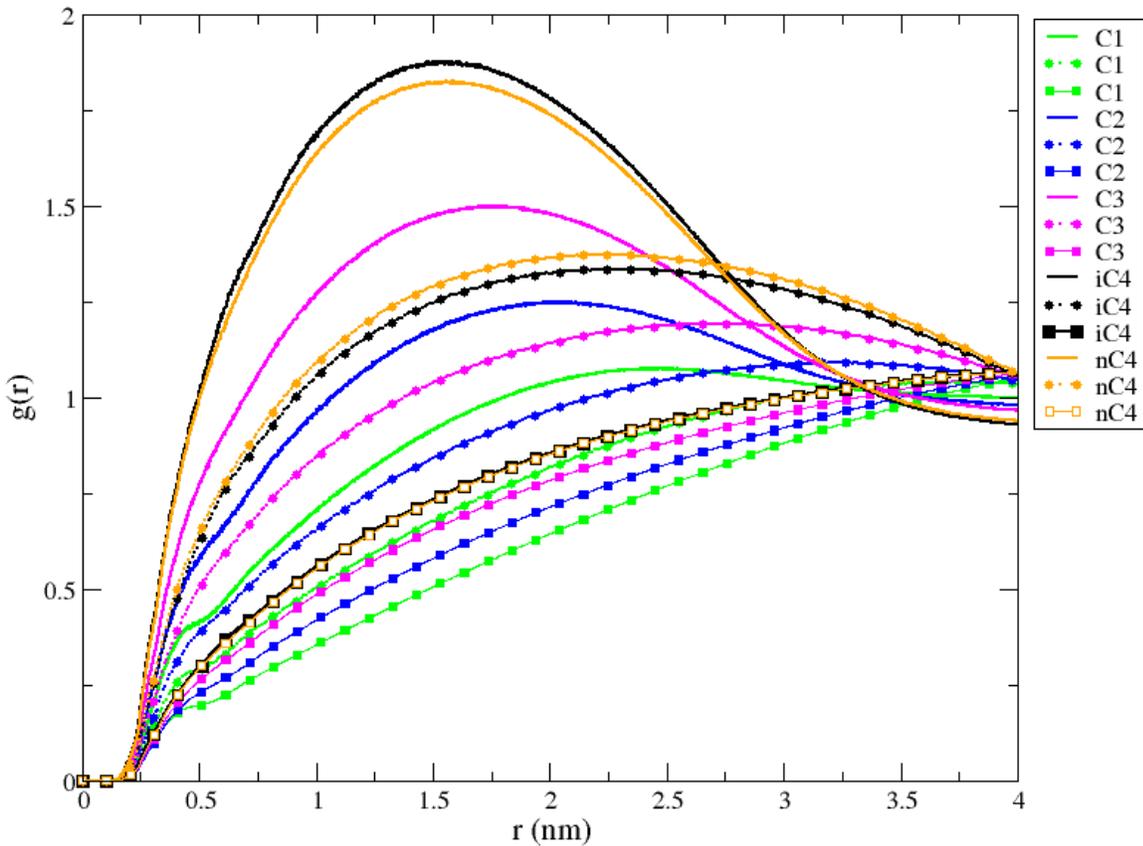


Figura 6.21: Función de distribución radial contra la distancia ( $r$ ) de los hidrocarburos: metano (verde), etano (azul), propano (rosa), isobutano (negro) y n-butano (naranja). Tomando de referencia el agua, para las diferentes concentraciones de agua: 25 % línea sólida, 50 % línea con círculos y 75 % línea con cuadrados.

En la Figura 6.21 se tiene función de distribución radial ( $g(r)$ ) contra la distancia ( $r$ ) de los hidrocarburos: metano (verde), etano (azul), propano (rosa), isobutano (negro) y n-butano (naranja); tomando como referencia la molécula de agua para las diferentes concentraciones de agua: 25 % línea sólida, 50 % línea con círculos y 75 % línea con cuadrados. Se puede apreciar como la forma en general de la función de distribución cambia conforme aumenta la concentración de agua en el sistema, esta se va atenuando, disminuye la altura del máximo y se va desplazando la ubicación de este (con respecto la distancia). También se puede apreciar como conforme disminuye el tamaño de la cadena del hidrocarburo disminuye la probabilidad de encontrarlo cerca del agua y a su vez se desplaza a mayores distancias. La forma de la  $g(r)$  es muy similar en los casos del isobutano y n-butano, tanto que para el caso de 75 % de agua estas líneas prácticamente se traslapan entre si.

En la Figura 6.22 se muestra la función de distribución radial contra la distancia ( $r$ ) de las moléculas de agua, tomando de referencia el agua, para las diferentes concentraciones de agua: 25 % línea punteada negra, 50 % línea con cuadrados roja y 75 % línea sólida verde. De

forma general uno podría pensar que la forma de la  $g(r)$  para el caso de estas moléculas se encuentra atenuada, pero si compramos las dimensiones de la  $g(r)$  para este caso contra la Figura 6.20 su máximo está alrededor de 5.5 y la Figura 6.21 donde su máximo es poco menor a 2, vemos que el valor de la probabilidad de encontrar las moléculas de agua alrededor de otras moléculas de agua es mucho mayor, esta está pasando las 80 u.a. para el primer pico. Esto lo podemos recordar en la visualización de los sistemas donde se puede apreciar cómo las moléculas de agua tienden a aglomerarse.

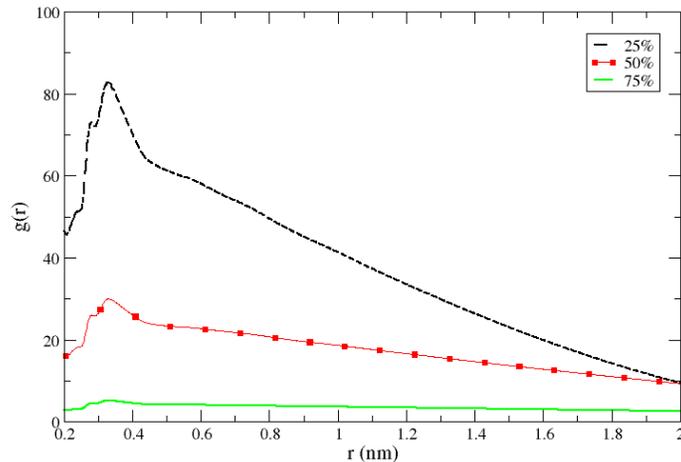


Figura 6.22: Función de distribución radial contra la distancia ( $r$ ) de las moléculas de agua, tomando de referencia el agua, para las diferentes concentraciones de agua: 25% línea punteada negra, 50% línea con cuadros roja y 75% línea sólida verde.

En esta sección se presentan los resultados de la probabilidad de encontrar ciertas moléculas alrededor de alguna de referencias. en cuestión de números los máximos de las  $g(r)$  de las moléculas (sin contar el agua) varían los valores de forma muy cercana entre 1 y 2 u.a., las moléculas en las que cambió su comportamiento fueron el dióxido de carbono y al ácido sulfhídrico, el dióxido de carbono para todos los casos fue la molécula que presentó una mayor probabilidad de encontrarse y a una menor distancia, esto puede ser debido a la velocidad en la que se movía en el sistema y a que no presentaba alguna disposición o acercamiento preferente. Para el caso del ácido sulfhídrico este presente una mayor probabilidad de estar cerca de dióxido de carbono, ácido sulfhídrico y una aún mayor si la molécula de referencia era el agua.

Los hidrocarburos muestran una mayor probabilidad al aumentar el número de carbonos en la cadena, eso se atribuye al tamaño de los mismos, al ser más grandes aumenta la probabilidad de que el cálculo encuentre alguno cerca, y esto se corrobora con la distancia en la que se encuentran la cual también aumenta al aumentar el tamaño de la cadena.

Para el caso de las funciones de distribución radial obtenidas tomando de referencia el agua las órdenes de magnitud de los máximos va variando, mientras que para el caso de los hidrocarburos es entre 0 y 2 u.a. y la forma de la  $g(r)$  se atenúa al aumentar la concentración de agua y la probabilidad es mayor cuando el tamaño de la cadena es más grande. Y el la

$g(r)$  del agua con respecto al agua se encuentra su máximo en valores de hasta 80 u.a. y este tamaño de la curva disminuye conforme aumenta la concentración de agua en el sistema.

## 6.2. Hidrocarburos livianos.

La forma de abordar esta sección es similar a la de la sección previa (gas), primero se presentará la visualización de los sistemas, después se abordarán las propiedades estructurales y las propiedades relacionadas a la movilidad de las moléculas, para el caso de estos sistemas no se presenta la función de distribución radial, la disposición de las moléculas queda descrita en la visualización y se retoman algunos resultados vistos en los sistemas anteriores para el comportamiento en la distribución de los hidrocarburos.

Recordemos que este sistema está formado por los hidrocarburos: isopentano, n-pentano, hexano, heptano, octano, nonano y decano.

### 6.2.1. Disposición de las moléculas en el sistema (visualización).

La visualización de los sistemas se hizo por medio de VMD, la forma de ver las moléculas es con el radio de van der Waals.

En las Figuras 6.23, 6.24, 6.25 y 6.26, se muestra la visualización de los diferentes sistemas simulados para el caso de los hidrocarburos livianos, recordemos que dicho sistema está formado básicamente de hidrocarburos (n-pentano, isopentano, hexano, heptano, octano, nonano y decano).

En la Figura 6.23 se muestra la visualización del sistema base (sistema sin moléculas de agua presentes), también en este panel se muestra el código de colores utilizado en las moléculas, para lograr distinguir las moléculas en el sistema por colores, este mismo se utiliza para todos los casos. En la Figura 6.24, se presenta el panel de las imágenes obtenidas por la visualización del primer sistema de hidrocarburos de este tipo con moléculas de agua (fracción molar presente de 25%), en las Figuras 6.25 y 6.26 se muestra los casos a 50% y 75% de fracción de agua respectivamente.

En la Figura 6.23 se encuentra el panel con las diferentes imágenes obtenidas del sistema, en el mismo instante, únicamente en cada recuadro se muestra solo un tipo de molécula para poder apreciar su distribución en el sistema, a excepción de (h) e (i), debido a que en (h) se muestra la visualización de una de las caras del sistema con todas las moléculas visibles y en (i) se presenta el código de colores de las moléculas, este código de colores establece que las moléculas correspondientes al isopentano se muestren rojas, a n-pentano se coloreen azules, las moléculas de hexano son naranjas, para el caso del heptano se muestran amarillas, en el octano son verdes, nonano moradas, y por último para el decano son de color negro. En los cuadros se muestran las moléculas con sus colores correspondientes para cada caso, entonces tenemos en (a) isopentano, (b) n-pentano, (c) hexano, (d) heptano, (e) octano, (f) nonano y (g) decano. En el cuadro (h) se puede apreciar como todas las moléculas aparentar estar en contacto entre sí, y no se logran ver espacios vacíos en el sistema, y si vemos la distribución

de las moléculas de hidrocarburos en el resto de los cuadros, se ve que el acomodo de estas no presentan alguna disposición preferencial.

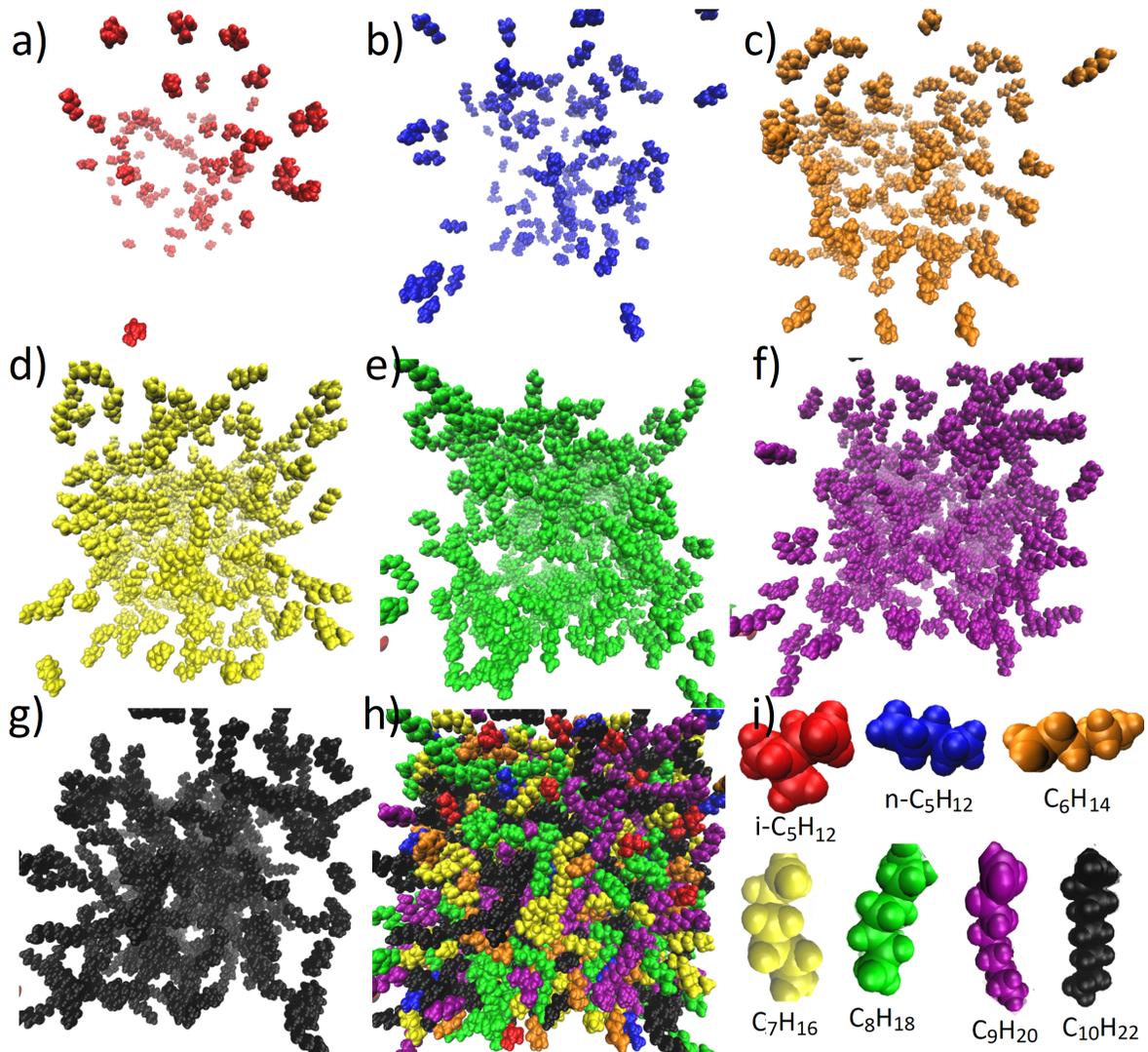


Figura 6.23: Visualización por VMD; del sistema de hidrocarburos livianos, en los cuadros tenemos las visualización únicamente de las moléculas de (a) isopentano, (b) n-pentano, (c) hexano, (d) heptano, (e) octano, (f) nonano y (g) decano, en (h) se muestran todas las moléculas en el sistema y en (i) el código de colores.

En la Figura 6.24 tenemos el panel con la visualización de las diferentes moléculas presentes en el mismo instante del caso del sistema de hidrocarburos livianos con 25% de fracción molar de moléculas de agua. Como en el caso de la Figura 6.23 en cada cuadro se visualiza sólo un tipo específico de molécula, sin embargo para este caso también se permite ver las moléculas de agua presente con un color grisáceo, tenemos en (a) isobutano + agua, (b) n-butano + agua, (c) hexano + agua, (d) heptano + agua, (e) octano + agua, (f) nonano + agua, (g) decano + agua, (h) agua y (i) todas las moléculas. La forma que pueden adoptar los hidrocarburos (moléculas individuales) es muy variable y también su distribución. En

lo que se puede apreciar en el panel, tenemos como las moléculas de agua se aglomeran formando una pequeña gota en el sistema, el aglomerado de las moléculas tiende a una forma esférica, ninguno de los hidrocarburos pudo penetrar la superficie de la gota, con el caso de los hidrocarburos de menor tamaño se ve una mayor distribución de estos el volumen y no se acumulan en la superficie de la gota, sin embargo al aumentar el tamaño de la cadena de los hidrocarburos estos si se logran apreciar alrededor de la superficie de la gota de agua. En (i) se ven todas las moléculas en el sistema y se logra apreciar como es un sistema compacto sin espacios libres entre las moléculas.

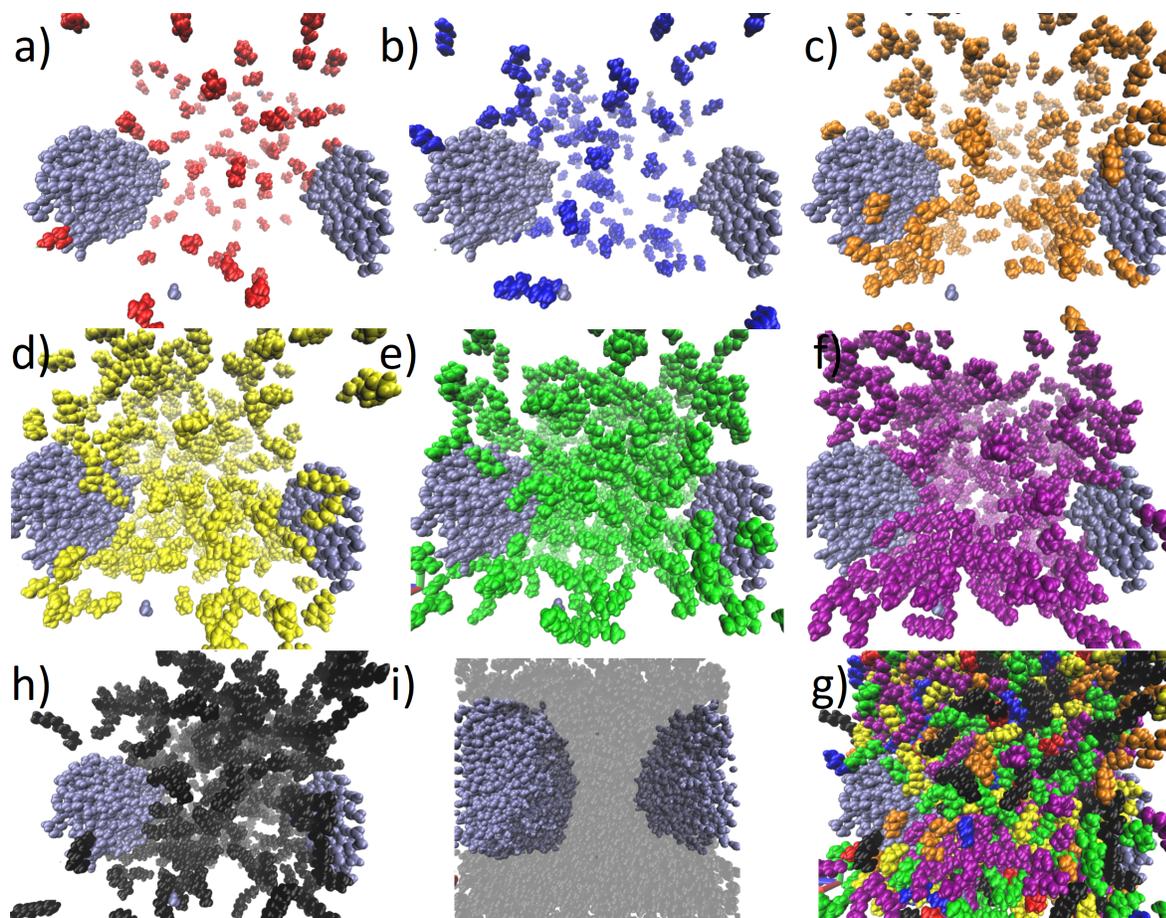


Figura 6.24: Visualización por VMD; del sistema de hidrocarburos livianos con 25% de F.M. de agua, en los cuadros tenemos las visualización únicamente de las moléculas de (a) isobutano + agua, (b) n-butano + agua, (c) hexano + agua, (d) heptano + agua, (e) octano + agua, (f) nonano + agua, (g) decano + agua, (h) agua y (i) todas las moléculas.

En la Figura 6.25 tenemos el panel con la visualización de las diferentes moléculas presentes en el mismo instante del caso del sistema de hidrocarburos livianos con 50% de fracción molar de moléculas de agua. En cada cuadro se visualiza sólo un tipo específico de molécula, sin embargo para este caso también se permite ver las moléculas de agua presente con un color grisáceo, tenemos en (a) isobutano + agua, (b) n-butano + agua, (c) hexano + agua, (d) heptano + agua, (e) octano + agua, (f) nonano + agua, (g) decano + agua, (h) agua y (i)

todas las moléculas. El comportamiento de este sistema es muy similar al caso de 25 %, se ve cómo las moléculas de agua se aglomeran, como esta aglomeración tiende a formar una esfera, pero el tamaño de la molécula se aprecia visiblemente superior (lo que corresponde al hecho de que tenemos mayor número de moléculas en el sistema) sin embargo se logra ver más homogénea la superficie de la gota. Se observa cómo al aumentar el tamaño de la cadena del hidrocarburo es más probable que se encuentre rodeando la gota de agua. En (i) se presenta la imagen del sistema con todas las moléculas involucradas, se ve como no hay espacio libre entre las moléculas y no se aprecia una distribución preferencial de los hidrocarburos. En (h) se visualizan las moléculas de agua en otro momento de la simulación, donde se logra ver la aglomeración de las moléculas prácticamente en el centro del sistema, esta imagen sirve para lograr observar adecuadamente la forma del aglomerado.

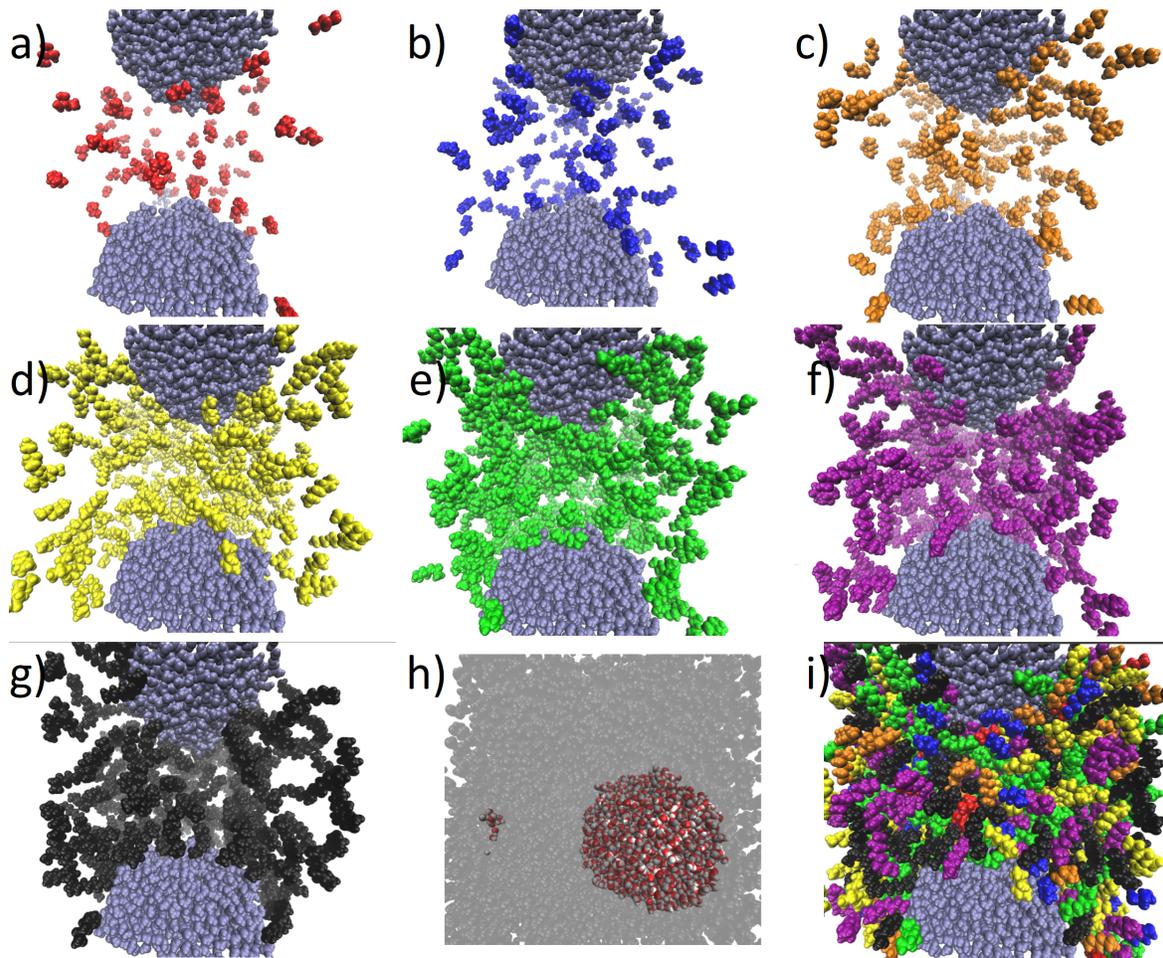


Figura 6.25: Visualización por VMD; del sistema de hidrocarburos livianos con 50% de F.M. de agua, en los cuadros tenemos las visualización únicamente de las moléculas de (a) isobutano +agua, (b) n-butano + agua, (c) hexano + agua, (d) heptano + agua, (e) octano + agua, (f) nonano +agua, (g) decano + agua, (h) agua y (i) todas las moléculas.

En la Figura 6.26 tenemos el panel con la visualización de las diferentes moléculas presentes en el mismo instante del caso del sistema de hidrocarburos livianos con 75% de fracción

molar de moléculas de agua. En cada cuadro se visualiza sólo un tipo específico de molécula, sin embargo para este caso también se permite ver las moléculas de agua presente con un color grisáceo, tenemos en (a) isobutano + agua, (b) n-butano + agua, (c) hexano + agua, (d) heptano + agua, (e) octano + agua, (f) nonano + agua, (g) decano + agua, (h) agua y (i) todas las moléculas. Lo que se puede apreciar en este caso es muy similar a los casos con menor cantidad de agua (casos anteriores), se ve cómo las moléculas de agua se aglomeran, como esta aglomeración tiende a formar una esfera, pero el tamaño de la molécula se aprecia visiblemente superior (lo que corresponde al hecho de que tenemos mayor número de moléculas en el sistema), se aprecia una superficie de la gota más lisa. Se observa cómo al aumentar el tamaño de la cadena del hidrocarburo es más probable que se encuentre rodeando la gota de agua. En (i) se presenta la imagen del sistema con todas las moléculas involucradas, se ve como no hay espacio libre entre las moléculas y no se aprecia una distribución preferencial de los hidrocarburos.

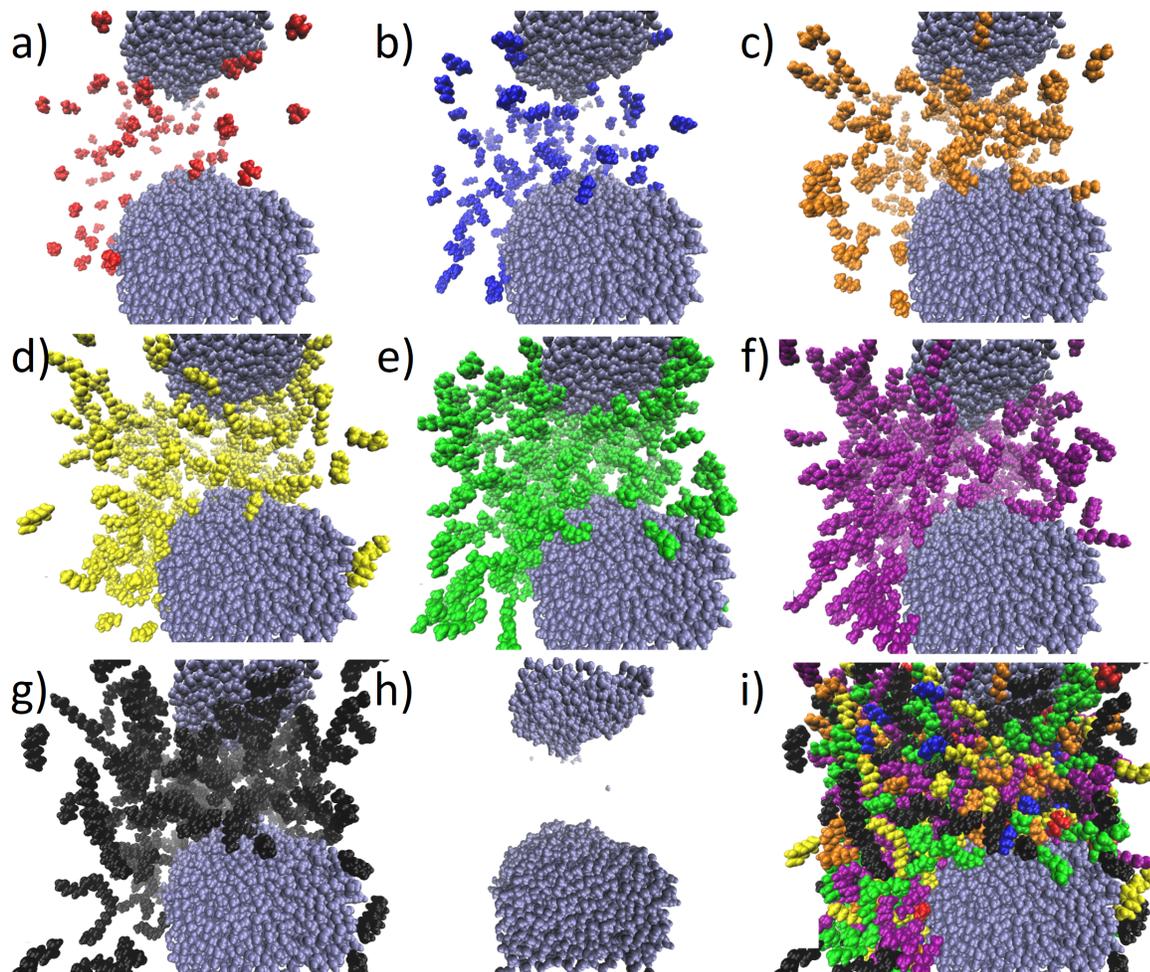


Figura 6.26: Visualización por VMD; del sistema de hidrocarburos livianos con 75% de F.M. de agua, en los cuadros tenemos las visualización únicamente de las moléculas de (a) isobutano + agua, (b) n-butano + agua, (c) hexano + agua, (d) heptano + agua, (e) octano + agua, (f) nonano + agua, (g) decano + agua, (h) agua y (i) todas las moléculas.

Se apreció el mismo comportamiento en los diferentes sistemas que presentan moléculas de agua, se forma una aglomeración de todas las moléculas presentes en una sola gota, no se observó una distribución preferencial de las moléculas de hidrocarburo, aparentemente cuando se tiene un mayor tamaño del hidrocarburo este tiene a esta en la superficie del aglomerado de moléculas de agua pero esta como tal no es debido a una preferencia sino al tamaño del sistema (ya que es un sistema muy pequeño) y a menor difusión de las moléculas, por lo que al toparse con un obstáculo (gota de agua) en su trayectoria continuaban oscilando alrededor de este.

A continuación se mostraran los resultados relacionados con la flexibilidad y estructura de las moléculas de hidrocarburo utilizadas en el sistema.

## 6.2.2. Propiedades estructurales de las moléculas.

En la Figura 6.27 se presenta la gráfica del promedio del radio de giro de los hidrocarburos contra el porcentaje de fracción molar de agua presente en el sistema simulado y en la Figura 6.28 se muestra el promedio del RMSD obtenido contra el porcentaje de fracción molar de agua. Si uno observa el comportamiento de ambas gráficas se logra apreciar cómo al aumentar la concentración de agua en el sistema, aumentan tanto el radio de giro como el RMSD, y también como el valor dichos valores están ligeramente relacionados con el tamaño del hidrocarburo ( a mayor tamaño mayor radio de giro y RMSD), este comportamiento en ambas propiedades se le puede atribuir a que al aumentar la concentración de agua en el sistema, la movilidad de las moléculas va disminuyendo y la disposición geométrica de sus átomos tiende a mantenerse abierta ('lineal').

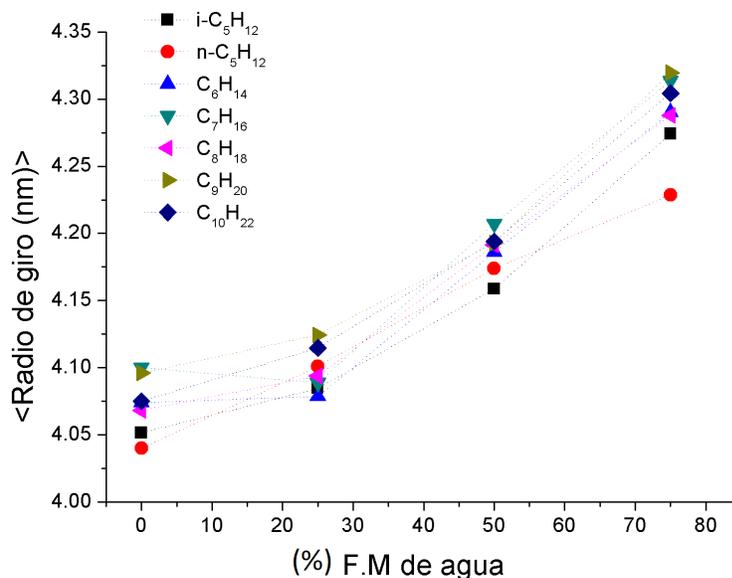


Figura 6.27: Promedio del radio de giro del hidrocarburo contra el porcentaje de fracción molar de agua presente.

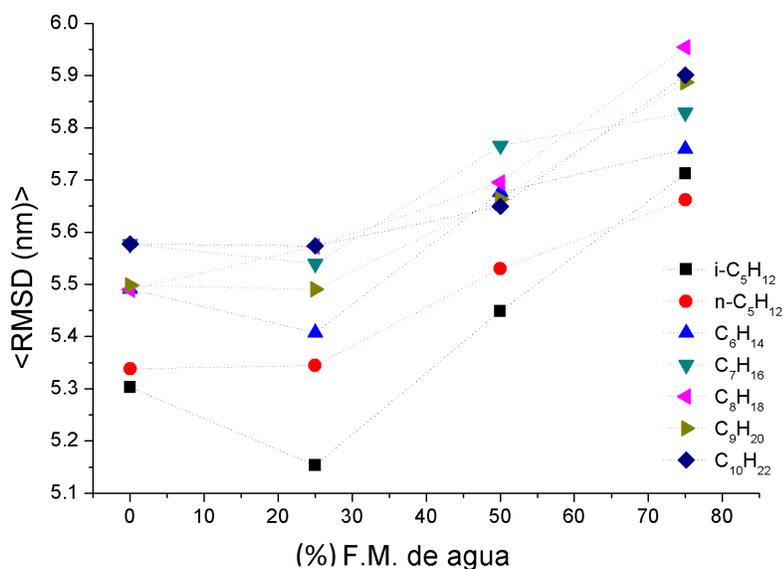


Figura 6.28: Promedio del RMSD obtenido contra el porcentaje de fracción molar de agua

En la Figura 6.29 se presenta la gráfica del promedio de la superficie accesible al solvente de los hidrocarburos contra el porcentaje de fracción molar de agua presente. En la gráfica se aprecia como aumenta el área accesible al solvente de la molécula conforme aumenta el tamaño de la cadena del hidrocarburo, pero dicho valor es constante para todos los casos, esto nos está indicando como a los hidrocarburos en el sistema les está siendo indiferente la presencia de agua en el sistema, ya que mantienen la misma superficie que en caso del sistema base (sistema sin agua).

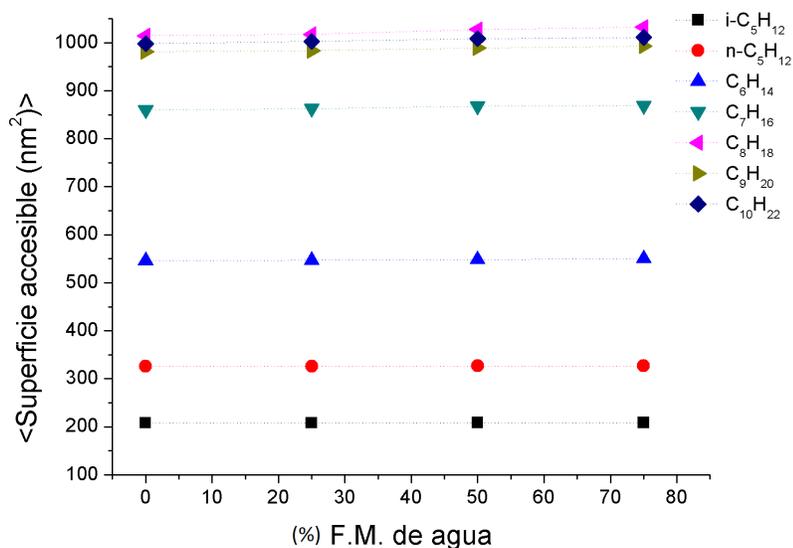


Figura 6.29: Promedio de la superficie accesible al solvente de los hidrocarburos contra el porcentaje de fracción molar de agua.

### 6.2.3. Propiedades relacionadas con la movilidad de las moléculas.

En esta sección se muestran los resultados de la evaluación del el MSD de las moléculas involucradas y a su vez el coeficiente de difusión de las mismas (valor obtenido a partir del MSD). Ambos resultados se presentan para ver el comportamiento en la difusión de las moléculas en los diferentes sistemas. En la Figura 6.30 se muestra el MSD con respecto al tiempo para los 4 sistemas (0, 25, 55 y 75 % de agua) y en la Figura 6.31 se muestra el coeficiente de difusión contra el porcentaje de fracción molar de agua en el sistema.

En la Figura 6.30 podemos apreciar que el MSD no cambia mucho en los diferentes sistemas, la variación el MSD a lo largo del tiempo entre los diferentes hidrocarburos no es muy grande ( apenas y se aprecia), y esta está relacionada con el tamaño del hidrocarburo, a menor tamaño de la cadena presenta mayor movilidad la molécula en el sistema y la difusión del agua es mucho menor, difiere en órdenes de magnitud a la de la difusión de los hidrocarburos. Esto se le atribuye a que tenemos un sistema donde el mayor volumen de los mismos lo ocupan los hidrocarburos (recordemos que en propiedades el agua no es afín a esta clase de moléculas).

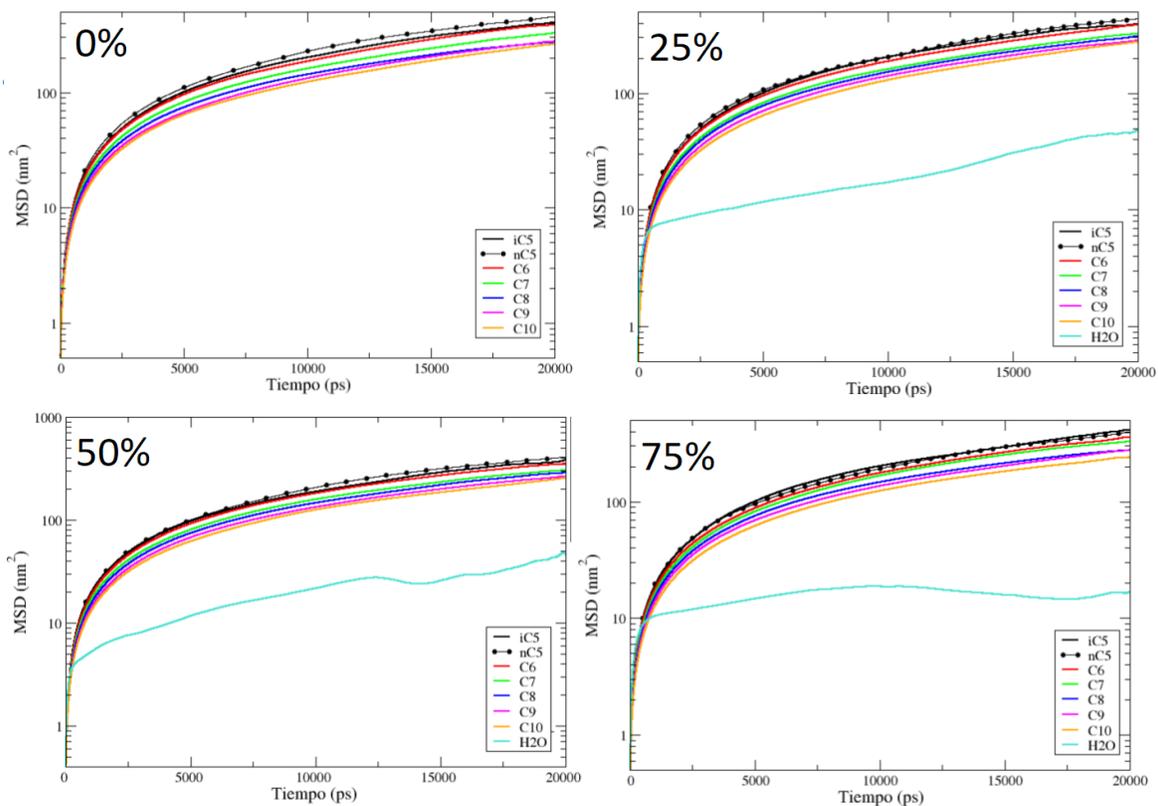


Figura 6.30: SD con respecto al tiempo para los 4 sistemas (0, 25, 55 y 75 % de agua).

En la Figura 6.31 se aprecia el mismo comportamiento que en caso del MSD, pero de una forma un poco más clara, el coeficiente de difusión de las moléculas de agua es cercano a cero, y el coeficiente de difusión de los hidrocarburos es mayor a menor tamaño de los

mismos y dichos valores oscilan en los mismos rangos para los diferentes sistemas.

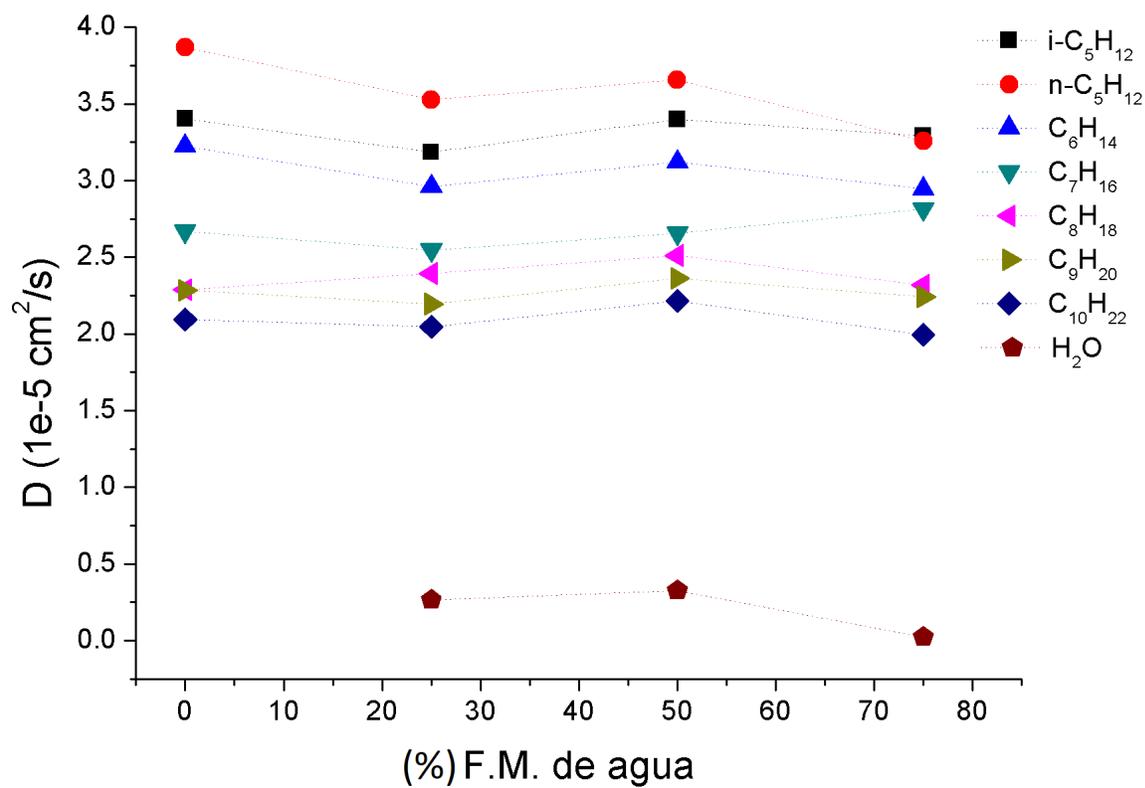


Figura 6.31: Coeficiente de difusión de todas las moléculas contra el porcentaje de fracción molar de agua presente.

### 6.3. Hidrocarburos medio pesados.

Sistema formado por las moléculas de undecano, dodecano, tridecano, tetradecano, penta-decano, hexadecano, heptadecano, octadecano, nonadecano e icosano. Se presenta la visualización de los sistemas a un tiempo 'x' de la simulación (Disposición de las moléculas en el sistema) esto para tener una mejor idea de la distribución de las moléculas en el sistema, después se presentarán los resultados obtenidos para las evaluaciones de la estructura de los hidrocarburos involucrados (radio de giro, RMSD y superficie accesible al solvente), a continuación se presenta las propiedades relacionadas con la movilidad de las moléculas (MSD y coeficiente de difusión).

#### 6.3.1. Disposición de las moléculas en el sistema (Visualización).

La visualización de los sistemas se hizo por medio de VMD, la forma de ver las moléculas es con el radio de van der Waals.

En las Figuras 6.32, 6.33, 6.34 y 6.35 se muestra la visualización de los diferentes sistemas simulados para el caso del sistema formado por los hidrocarburos el cual su peso molecular cataloga como semi-pesados, tales como undecano, dodecano, tridecano, tetradecano, pentadecano, hexadecano, heptadecano, octadecano, nonadecano e icosano. En la Figura 6.32 se presenta la visualización del sistema base (sin agua), en la Figura ?? se presenta la visualización del sistema con 25% de fracción molar de agua, en la Figura 6.34 tenemos el sistema con 50% de fracción molar de agua, y en la figura 6.35 el último caso el cual tiene un porcentaje de 75% (F.M.).

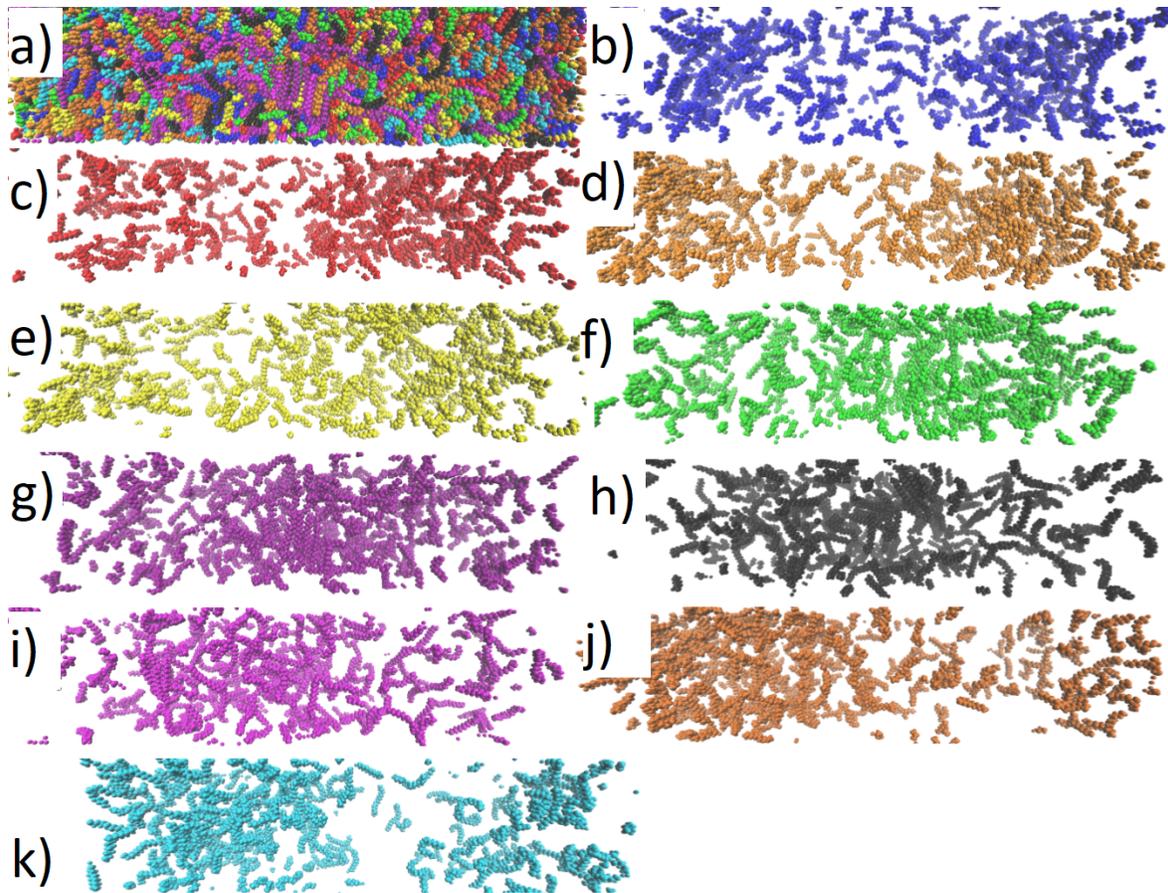


Figura 6.32: Visualización del sistema de hidrocarburos semi-pesados. (a) se presentan todas las moléculas involucradas, en resto de los cuadros se muestran moléculas específicas (b) undecano, (c) dodecano, (d) tridecano, (e) tetradecano, (f) pentadecano, (g) hexadecano, (h) heptadecano, (i) octadecano, (j) nonadecano y (k) eicosano.

En la Figura 6.32 se presenta la visualización de las diferentes moléculas involucradas para el mismo instante del sistema base para los sistemas de hidrocarburos medio-pesados. (caso sin agua). En el primer cuadro (a) se presentan todas las moléculas involucradas, en resto de los cuadros se muestran moléculas específicas (b) undecano, (c) dodecano, (d) tridecano, (e) tetradecano, (f) pentadecano, (g) hexadecano, (h) heptadecano, (i) octadecano, (j) nonadecano, (k) eicosano. En el panel se no se aprecia del todo una distribución homogénea para

el caso de los hidrocarburos de mayor tamaño, esto se le puede atribuir al acomodo de las moléculas en la construcción del sistema, y debido a la densidad del mismo el tiempo no fue lo suficientemente largo para que se lograra una difusión de las mismas y se obtuviera una distribución homogénea (esto se aprecia en los cuadros (k) y (j) donde se pueden ver espacios vacíos).

En la Figura 6.33 se muestra la visualización del sistema de hidrocarburos semi-pesados con 25 % de fracción molar de agua. (a) se presentan todas las moléculas involucradas, en resto de los cuadros se muestran moléculas específicas, (b) moléculas de agua, (c) undecano + agua, (d) dodecano + agua, (e) tridecano + agua, (f) tetradecano + agua, (g) pentadecano + agua, (h) hexadecano + agua, (i) heptadecano + agua, (j) octadecano + agua, (k) nonadecano + agua y (l) eicosano + agua. En la figura (b) se puede apreciar cómo se formaron varios aglomerados de moléculas de agua en el sistema, en el resto de los cuadros se aprecia una distribución homogénea de los hidrocarburos en el sistema, sin presentar un acomodo preferente ya sea en zonas específicas o alrededor de las moléculas de agua.

En la Figura 6.34 se presenta la visualización del sistema de hidrocarburos semi-pesados con 50 % de fracción molar de agua. En el cuadro (a) se muestran todas las moléculas involucradas, en resto de los cuadros se muestran moléculas específicas, (b) moléculas de agua, (c) undecano + agua, (d) dodecano + agua, (e) tridecano + agua, (f) tetradecano + agua, (g) pentadecano + agua, (h) hexadecano + agua, (i) heptadecano + agua, (j) octadecano + agua, (k) nonadecano + agua y (l) eicosano + agua. En la figura (b) se puede apreciar cómo se formaron varios aglomerados de moléculas de agua en el sistema pero en comparación del caso anterior los aglomerados presenta una superficie más homogénea, en el resto de los cuadros se aprecia una distribución homogénea de los hidrocarburos en el sistema, sin presentar un acomodo preferente ya sea en zonas específicas o alrededor de las moléculas de agua.

En la Figura 6.35 se presenta la visualización del sistema de hidrocarburos semi-pesados con 75 % de fracción molar de agua. (a) se presentan todas las moléculas involucradas, en resto de los cuadros se muestran moléculas específicas, (b) undecano + agua, (c) dodecano + agua, (d) tridecano + agua, (e) tetradecano + agua, (f) pentadecano + agua, (g) hexadecano + agua, (h) heptadecano + agua, (i) octadecano + agua, (j) nonadecano + agua y (k) eicosano + agua. En los cuadros se logra apreciar cómo se formaron varios aglomerados de moléculas de agua pero en comparación del casos anteriores presentan formas aún más esféricas y una superficie más homogénea, se aprecia una distribución homogénea de los hidrocarburos en el sistema, sin presentar un acomodo preferente ya sea en zonas específicas o alrededor de las moléculas de agua.

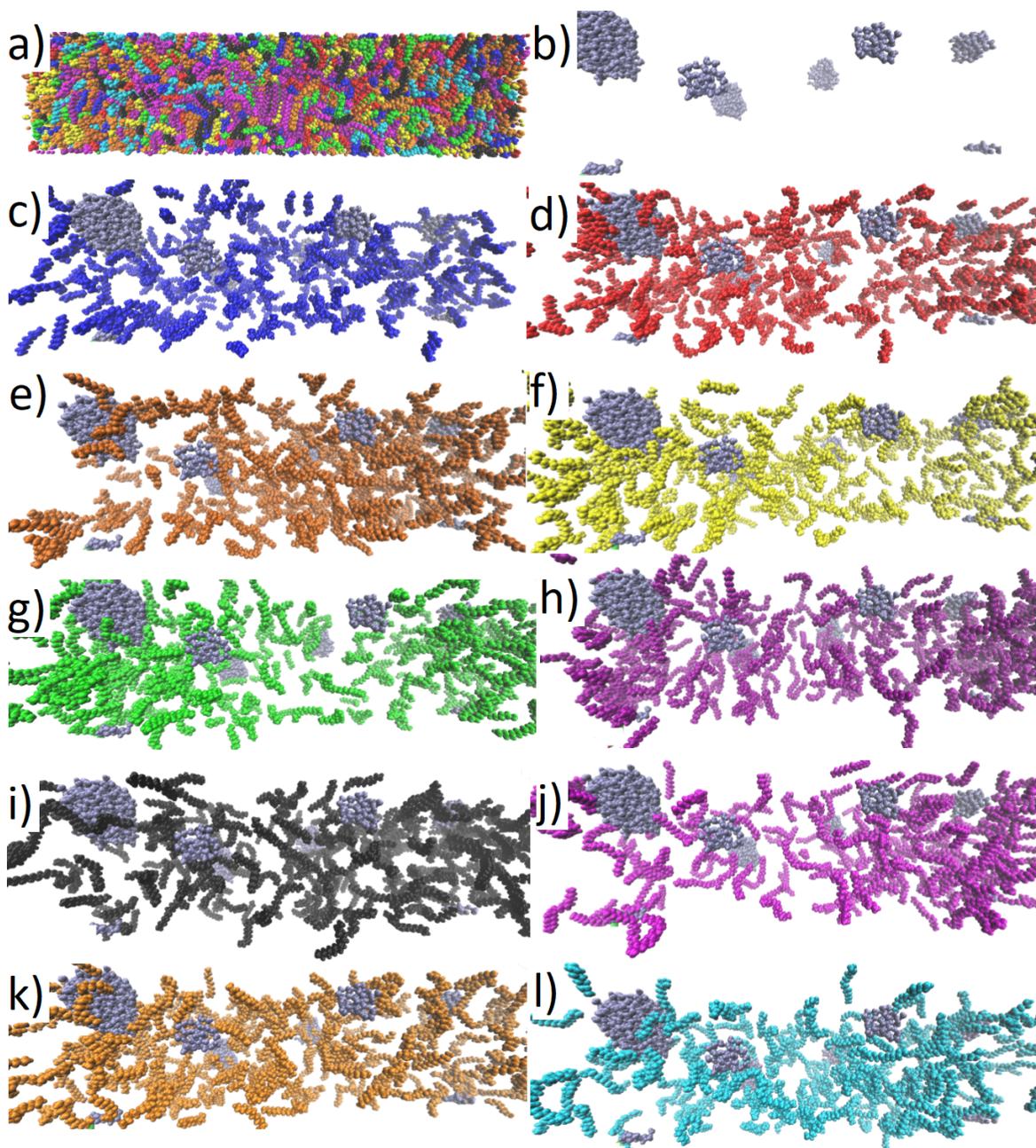


Figura 6.33: Visualización del sistema de hidrocarburos semi-pesados con 25% de fracción molar de agua. (a) se presentan todas las moléculas involucradas, en resto de los cuadros se muestran moléculas específicas, (b) moléculas de agua, (c) undecano + agua, (d) dodecano + agua, (e) tridecano + agua, (f) tetradecano + agua, (g) pentadecano + agua, (h) hexadecano + agua, (i) heptadecano + agua, (j) octadecano + agua, (k) nonadecano + agua y (l) eicosano + agua.

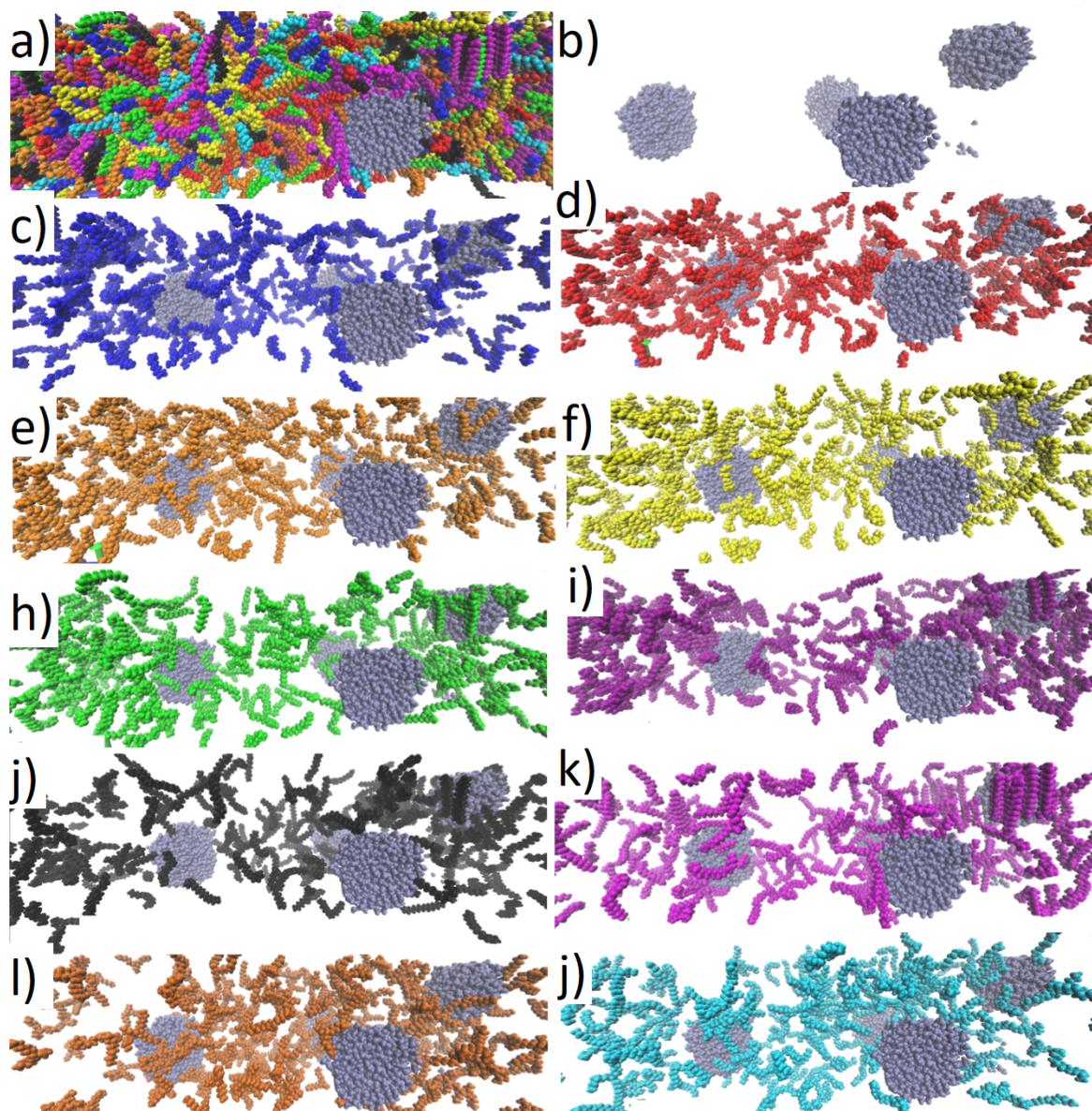


Figura 6.34: Visualización del sistema de hidrocarburos semi-pesados con 50% de fracción molar de agua. (a) se presentan todas las moléculas involucradas, en resto de los cuadros se muestran moléculas específicas, (b) moléculas de agua, (c) undecano + agua, (d) dodecano + agua, (e) tridecano + agua, (f) tetradecano + agua, (g) pentadecano + agua, (h) hexadecano + agua, (i) heptadecano + agua, (j) octadecano + agua, (k) nonadecano + agua y (l) eicosano + agua.

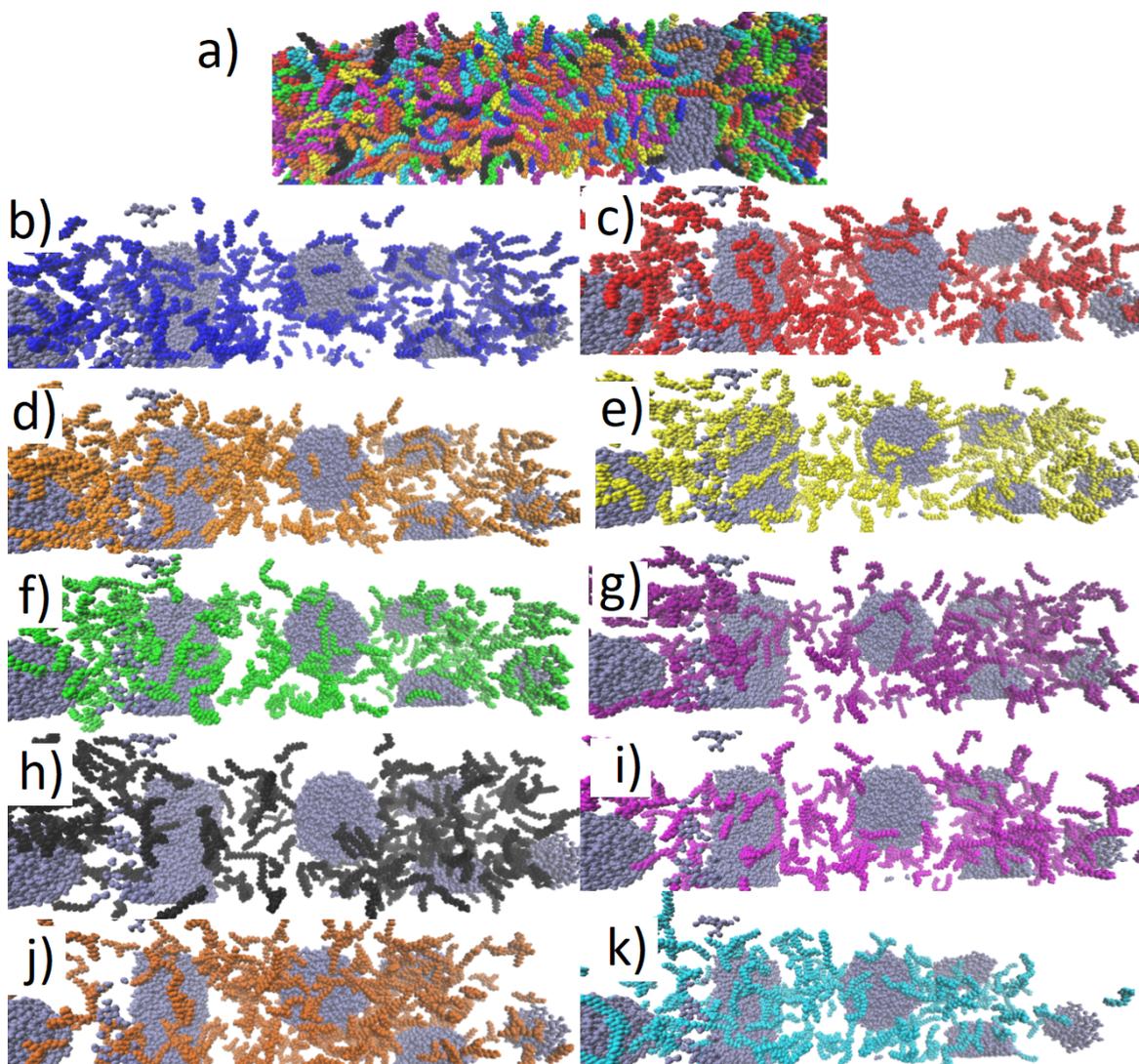


Figura 6.35: Visualización del sistema de hidrocarburos semi-pesados con 75% de fracción molar de agua. (a) se presentan todas las moléculas involucradas, en resto de los cuadros se muestran moléculas específicas, (b) undecano + agua, (c) dodecano + agua, (d) tridecano + agua, (e) tetradecano + agua, (f) pentadecano + agua, (g) hexadecano + agua, (h) heptadecano + agua, (i) octadecano + agua, (j) nonadecano + agua y (k) eicosano + agua.

### 6.3.2. Propiedades estructurales de las moléculas

En la Figura 6.36 se presenta la gráfica del promedio del radio de giro de los hidrocarburos contra el porcentaje de fracción molar de agua presente en el sistema simulado y en la Figura 6.37 se muestra el promedio del RMSD obtenido contra el porcentaje de fracción molar de agua. Si uno observa el comportamiento de ambas gráficas se logra apreciar cómo al aumentar la concentración de agua en el sistema, aumentan tanto el radio de giro como el RMSD. El comportamiento del radio de giro y el RMSD no presenta una visible relación con el tamaño del hidrocarburo, el menor radio de giro lo presentan las moléculas de nonadecano

y eicosano, y las moléculas que presentan un mayor radio de giro es el caso del pentadecano y hexadecano, el resto de los casos oscilan entre estos extremos, y algo muy similar pasa en el caso del RMSD.

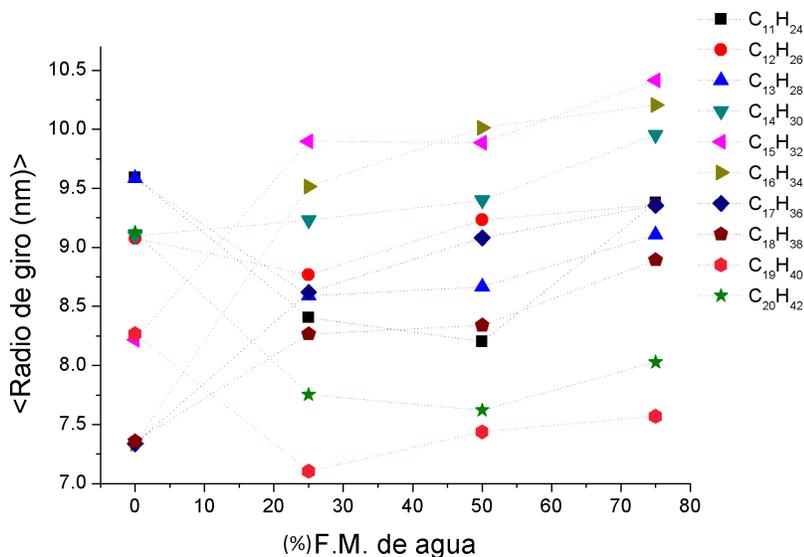


Figura 6.36: Promedio del radio de giro de los hidrocarburos contra el porcentaje de fracción molar de agua.

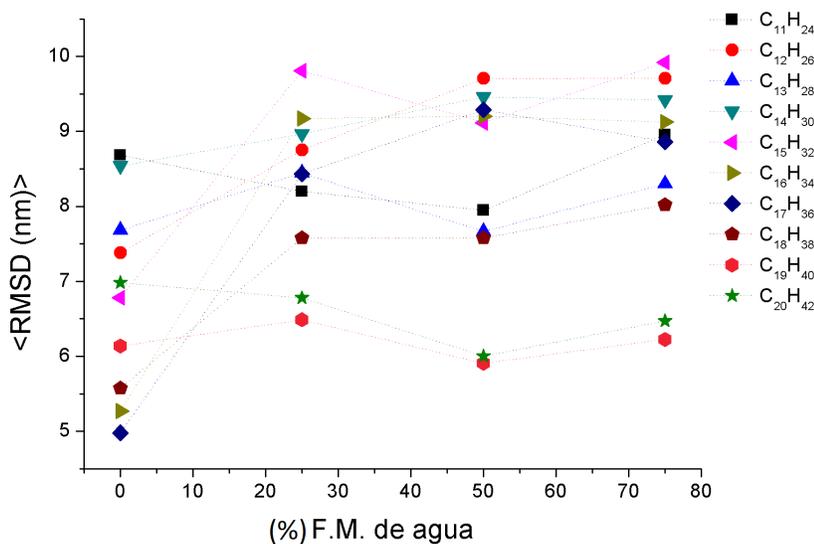


Figura 6.37: RMSD del radio de giro de los hidrocarburos contra el porcentaje de fracción molar de agua.

En la Figura 6.38 se presenta la gráfica del promedio de la superficie accesible al solvente de los hidrocarburos contra el porcentaje de fracción molar de agua presente. En la gráfica

se aprecia como aumenta el área accesible al solvente de la molécula conforme aumenta el tamaño de la cadena del hidrocarburo, pero dicho valor es constante para todos los casos, esto nos está indicando como a los hidrocarburos en el sistema les está siendo indiferente la presencia de agua en el sistema, ya que mantienen la misma superficie que en caso del sistema base (sistema sin agua).

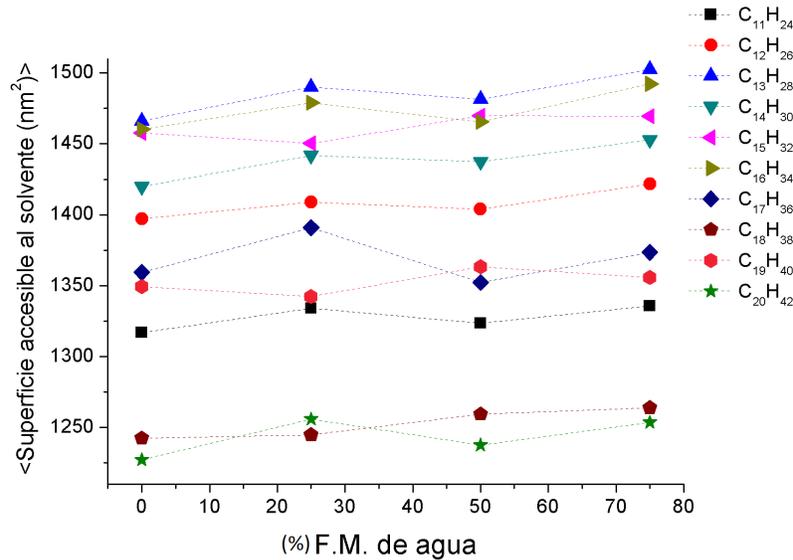


Figura 6.38: Superficie accesible al solvente de los hidrocarburos contra el porcentaje de fracción molar de agua.

### Propiedades relacionadas a la movilidad de las moléculas en el sistema.

En esta sección se muestran los resultados de la evaluación del el MSD de las moléculas involucradas y a su vez el coeficiente de difusión de las mismas (valor obtenido a partir del MSD). Ambos resultados se presentan para ver el comportamiento en la difusión de las moléculas en los diferentes sistemas. En la Figura 6.39 se muestra el MSD con respecto al tiempo para los 4 sistemas (0, 25, 55 y 75% de agua) y en la Figura 6.40 se muestra el coeficiente de difusión contra el porcentaje de fracción molar de agua en el sistema.

En la Figura 6.39 podemos apreciar que el MSD no cambia mucho en los diferentes sistemas, la variación el MSD a lo largo del tiempo entre los diferentes hidrocarburos no es muy grande ( apenas y se aprecia), y esta está relacionada con el tamaño del hidrocarburo, a menor tamaño de la cadena presenta mayor movilidad la molécula en el sistema y la difusión del agua menor. Pero en los casos de los sistemas con agua la molécula del eicosano presenta mayor difusión que el caso del nonadecano.

En la Figura 6.40 se aprecia el mismo comportamiento que en caso del MSD, pero de una forma un poco más clara, el coeficiente de difusión de las moléculas de agua es cercano a cero, y el coeficiente de difusión de los hidrocarburos es mayor a menor tamaño de los mismos y dichos valores oscilan en los mismos rangos para los diferentes sistemas, aunque aumentan ligeramente al aumentar la concentración de agua en los mismos.

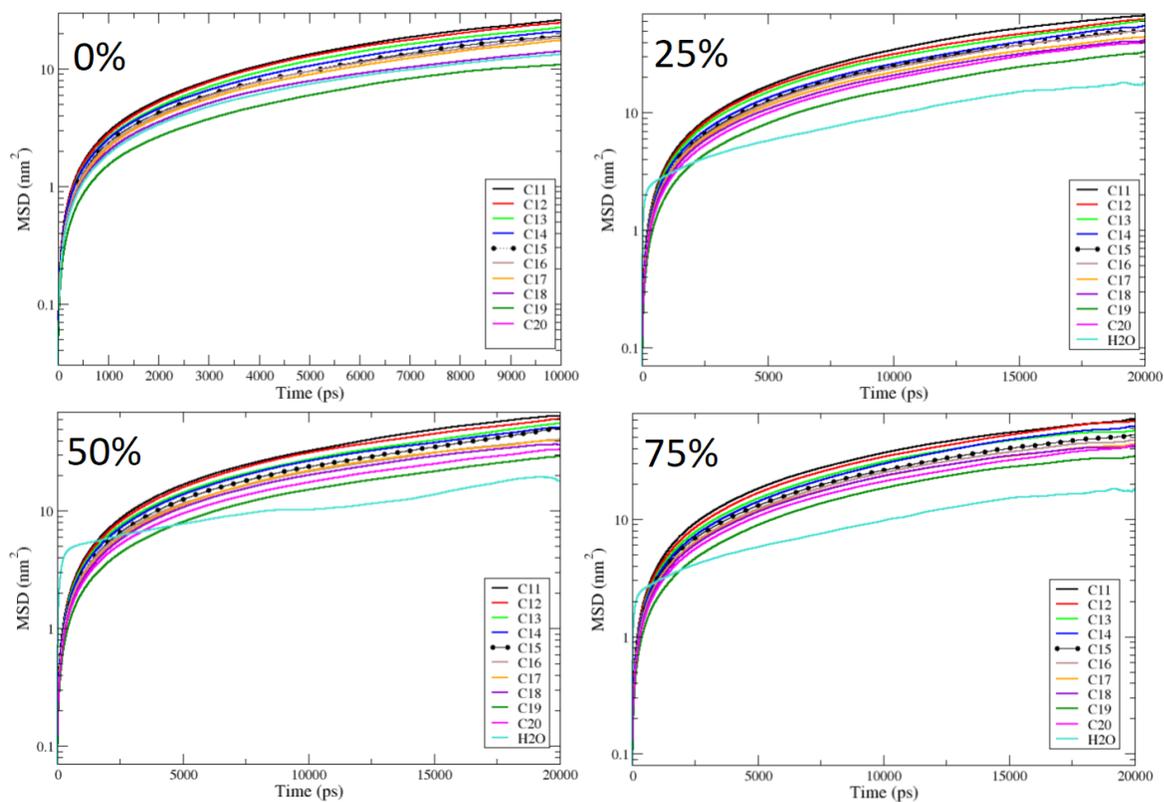


Figura 6.39: MSD con respecto al tiempo para los 4 sistemas (0, 25, 55 y 75 % de agua).

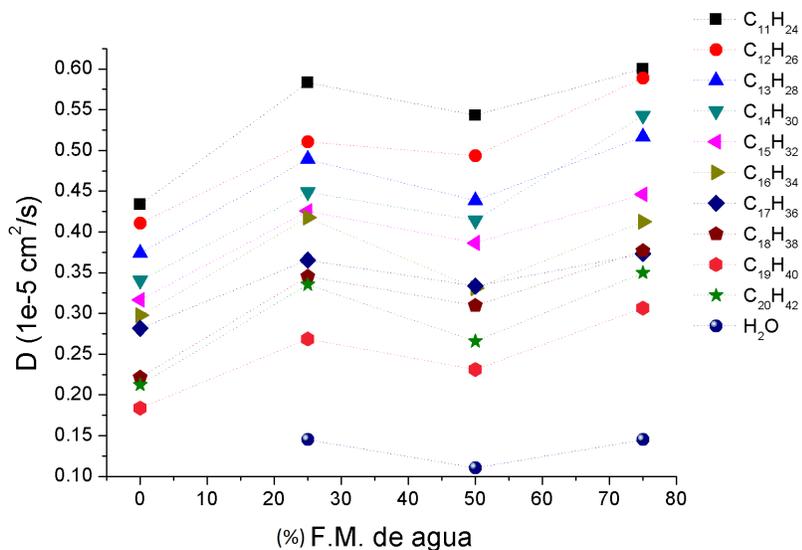


Figura 6.40: Coeficiente de difusión de todas las moléculas involucradas contra el porcentaje de fracción molar de agua.

## 6.4. Propiedades macroscópicas.

De los sistemas simulados (gas, hidrocarburos livianos e hidrocarburos semi-pesados), e calcularon las propiedades de bulto de la densidad y la viscosidad de los diferentes casos tratados. En la Figura 6.41 se presenta la gráfica de la densidad obtenida contra el porcentaje de fracción molar para los diferentes sistemas, y en la Figura 6.42 se muestra la gráfica de la viscosidad contra el porcentaje de fracción molar de los diferentes casos trabajados.

En la Figura 6.41 se aprecia como para el caso de los sistemas con hidrocarburos livianos y semipesados la densidad no varió mucho con la concentración de agua, se observa un ligero incremento en los valores (prácticamente imperceptible), pero en el caso del gas este presentó un aumento en la densidad al aumentar la concentración de agua presente y este aumento fue de manera considerable con 75% de fracción molar de agua.

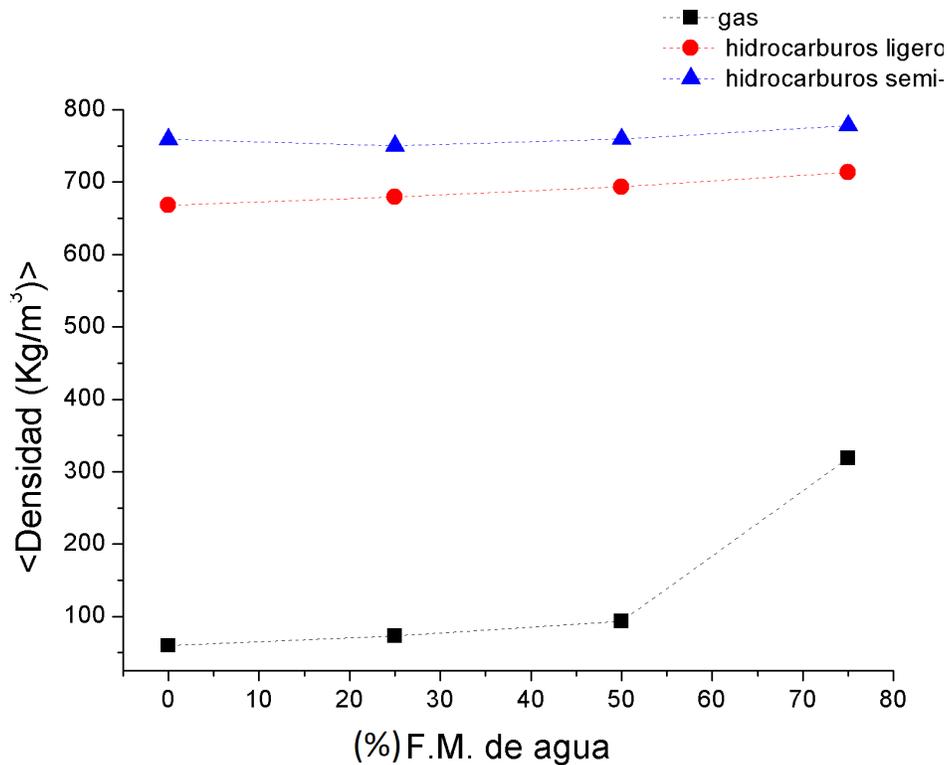


Figura 6.41: Densidad contra el porcentaje de fracción molar para los diferentes sistemas. Los cuadros indican el sistema de gas, los círculos rojos el caso de los hidrocarburos livianos y los triángulos azules el caso de los hidrocarburos semi-pesados.

Recordemos que la viscosidad de un fluido es una medida de su resistencia a las deformaciones graduales producidas por tensiones cortantes. En la Figura 6.42 se ve como en el caso de los sistemas de gas la viscosidad del mismo se mantiene en prácticamente cero, recordemos este sistema con las condiciones en las que se realizaron las simulaciones se comporta como un gas comprimido, pero sigue siendo gas, y el coeficiente de difusión obtenido para las

moléculas de este sistema es varios órdenes de magnitud diferente con los otros, por lo que tiene sentido que la viscosidad que presenta el mismo es prácticamente de cero. Sin embargo para el caso de los hidrocarburos ligeros y semipesados la viscosidad cambio con la concentración de agua presente en el sistema, y este comportamiento no fue de manera gradual, a 25 % presenta una mayor viscosidad para ambos casos, a 50 % disminuye el valor (tienen un valor aún menor al del sistema sin agua) y a 75 % vuelve a aumentar la viscosidad (queda un valor menor al caso de 25 % pero mayor al sistema sin agua), sin embargo sistemas con hidrocarburos pesados presentan viscosidades mayores lo que era de esperar de acuerdo a los resultados obtenidos del coeficiente de difusión de las moléculas los cuales fueron menores a uno.

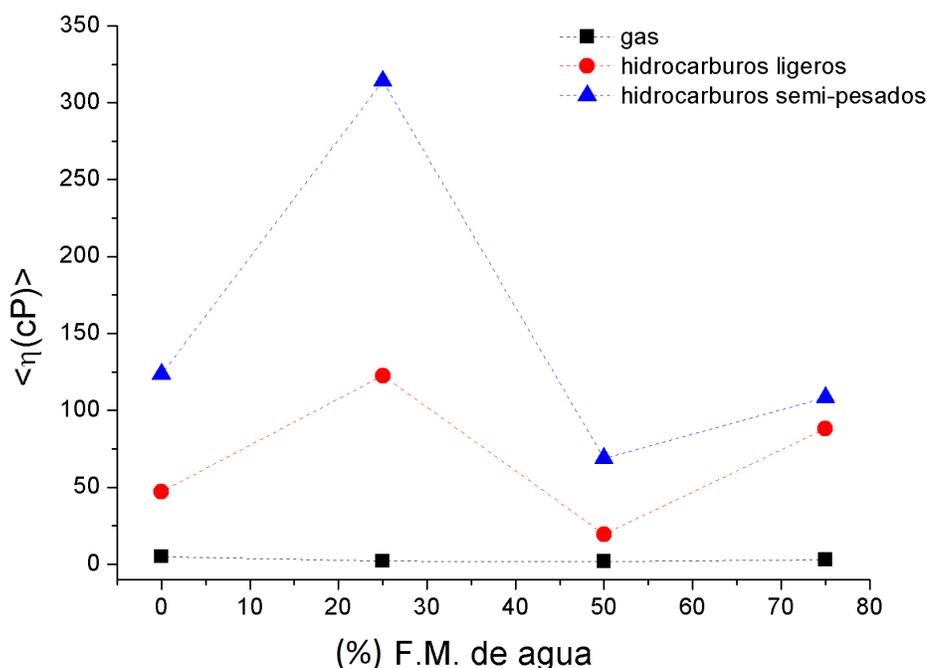


Figura 6.42: Viscosidad dinámica de bulto contra el porcentaje de fracción molar. Los cuadros indican el sistema de gas, los círculos rojos el caso de los hidrocarburos livianos y los triángulos azules el caso de los hidrocarburos semi-pesados.

## 6.5. Resumen de resultados.

La evaluación de las moléculas mostró cómo se pueden seleccionar las condiciones en las cuales realizar las simulaciones de dinámica molecular, que los archivos de entrada (geometrías e información de enlaces y energías) eran compatibles con el campo de fuerza seleccionado, al ser evaluadas las moléculas al vacío se observó como las propiedades estructurales de estas dependían completamente del número de carbonos en la cadena (tamaño de la molécula).

De los sistemas construidos con un solo tipo de molécula, se observó como la presencia de otras moléculas en el sistema (aunque sean del mismo tipo) tiene efecto en el comporta-

miento de las propiedades estructurales de las moléculas, se observó como el tamaño de la molécula determinada la conformación que adoptaron estas en la caja de simulación, para los hidrocarburos más pequeños se obtuvo un comportamiento de tipo gas, los hidrocarburos con mayor tamaño se veía un comportamiento de tipo líquido y para las moléculas más grandes el sistema se comportaba como si fuera un líquido super viscoso, las densidades obtenidas para los sistemas simulados fueron muy cercanas a las reportadas en condiciones estándar en los sistemas reales.

Para el caso de las mezclas de hidrocarburos el sistema que obtuvo un comportamiento más variado en el acomodo o interacción de las moléculas presentes fue el sistema de gas, esto debido a que en este se encontraban un mayor tipo de moléculas (no solo hidrocarburos y agua). Pero en todos los casos se observa cómo las moléculas de agua forman un aglomerado y limitan su interacción con los hidrocarburos. Para todos los casos la superficie accesible al solvente de los hidrocarburos fue independiente a la concentración de agua en el sistema, esto se le atribuye a que los hidrocarburos son lo que ocupan mayor volumen en el sistema por lo que estos son el solvente del mismo. En todos los casos la molécula que presenta un menor coeficiente de difusión es la molécula de agua.

Este sistema a las condiciones evaluadas se comportó como un gas comprimido, las propiedades estructurales de los hidrocarburos presentes eran dependientes al tamaño de la cadena (a mayor número de carbonos en la cadena el radio de giro y el RMSD aumentaban) pero fueron independientes a la presencia de agua, a excepción del sistema con mayor concentración de agua en este caso los resultados indican que la movilidad de las moléculas y su plegamiento disminuye, esto se le puede atribuir a la presencia del aglomerado de las moléculas de agua en el sistema, lo cual entorpece el movimiento de las moléculas en la caja de simulación. Debido a que en la visualización de estos casos se podía ver como el  $H_2S$  tenía la posibilidad de internarse en el aglomerado de moléculas de agua se obtuvo la función de distribución radial de los sistemas, se observó cómo el comportamiento de la distribución de los hidrocarburos es invariante, el dióxido de carbono en todos los casos a excepción del agua es la molécula que presenta mayor probabilidad de encontrarse alrededor de alguna de referencia, sin embargo las moléculas de  $H_2S$  y agua si presentan una preferencia en su acomodo, el agua prefiere estar cerca de otras moléculas de agua, y al  $H_2S$  le gusta estar cerca de las moléculas de agua. El coeficiente de difusión de estos sistemas es muy elevado, lo que contribuye a reconocer al sistema como un gas comprimido, esto también se aprecia en la viscosidad que presenta el sistema la cual es prácticamente de cero.

En el caso de los sistemas de hidrocarburos livianos y semipesados, al no presentar otro tipo de moléculas, la distribución que se apreció en los sistemas fue homogénea (hidrocarburos + aglomerado de moléculas de agua), el caso de los hidrocarburos livianos se observa un comportamiento estructural de los hidrocarburos relacionados con el tamaño ( el radio de giro y el RMSD aumenta conforme aumenta el número de carbonos en la cadena), este sistema presenta una viscosidad considerable, pero el caso de los hidrocarburos semi-pesados presentan una viscosidad aún más elevado y un coeficiente de difusión para todas las moléculas prácticamente de cero.

# Capítulo 7

## Conclusiones

Las simulaciones de dinámica molecular presentan una buena opción para el estudio de hidrocarburos, ya sea la evaluación del comportamiento a diferentes condiciones o el estudio del comportamiento con otra clase de moléculas.

Es posible obtener resultados interesantes y cercanos a lo reportado experimentalmente en propiedades macroscópicas con sistemas prácticamente pequeños (como fue el caso de los sistemas con un solo tipo de molécula donde se utilizaron únicamente 100 moléculas).

Es posible realizar el estudio teóricos de esta índole a sistemas complejos como es el caso de las mezclas de hidrocarburos, y observar comportamientos en los sistemas similares a lo que se observa en sistemas a mesoescala (como el hecho de que se formaran las gotas de agua por la no afinidad que esta presenta con los hidrocarburos).

Es posible realizar el estudio de diferentes estados de agregación de las moléculas involucradas (dependiendo de las condiciones establecidas para la simulación).

A mayor tamaño de las moléculas es necesario un acomodo más random, para obtener una mejor distribución de la moléculas y evitar el empaquetamiento, también es necesario aumentar los tiempos y las temperaturas de la equilibración.

Para el caso de hidrocarburos es más recomendable utilizar el campo de fuerza OPLS-aa antes que el GROMOS.

# Capítulo 8

## Perspectivas-Recomendaciones

Evaluar con mayor profundidad y en otra clase de propiedades los resultados de las simulaciones.

Repetición de los sistemas pero con presencia de moléculas de otro tipo, como podrían ser sales o hidrocarburos con heteroátomos, debido al interés en la distribución y comportamiento de los mismos.

# Apéndice A

## Inputs de las moléculas utilizadas.

Leyena por parte de ATB.

```
;
; Automatic Topology Builder
;
; REVISION 2017-10-25 13:58:55
;-----
; Authors : Alpekshkumar K. Malde, Le Zuo, Matthew Breeze, Martin Stroet, Alan E. Mark
;
; Institute : Molecular Dynamics group,
; School of Chemistry and Molecular Biosciences (SCMB),
; The University of Queensland, QLD 4072, Australia
; URL : http://compbio.biosci.uq.edu.au/atb
; Citation : Malde AK, Zuo L, Breeze M, Stroet M, Poger D, Nair PC, Oostenbrink C, Mark AE.
; An Automated force field Topology Builder (ATB) and repository: version 1.0.
; Journal of Chemical Theory and Computation, 2011, 7(12), 4026-4037.
; http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct200196m
;
; Disclaimer :
; While every effort has been made to ensure the accuracy and validity of parameters provided below
; the assignment of parameters is being based on an automated procedure combining data provided by a
; given user as well as calculations performed using third party software. They are provided as a guide.
; The authors of the ATB cannot guarantee that the parameters are complete or that the parameters provided
; are appropriate for use in any specific application. Users are advised to treat these parameters with discretion
; and to perform additional validation tests for their specific application if required. Neither the authors
; of the ATB or The University of Queensland except any responsibly for how the parameters may be used.
;
; Release notes and warnings:
; (1) The topology is based on a set of atomic coordinates and other data provided by the user after
; after quantum mechanical optimization of the structure using different levels of theory depending on
; the nature of the molecule.
; (2) In some cases the automatic bond, bond angle and dihedral type assignment is ambiguous.
; In these cases alternative type codes are provided at the end of the line.
; (3) While bonded parameters are taken where possible from the nominated force field non-standard bond, angle and dihedral
; type code may be incorporated in cases where an exact match could not be found. These are marked as "non-standard"
; or uncertain in comments.
; (4) In some cases it is not possible to assign an appropriate parameter automatically. "
; for those fields that could not be determined automatically. The parameters in these fields must be assigned manually
; before the file can be used.
;-----
; Input Structure : nc5
; Output : ALL ATOM topology
; Use in conjunction with the corresponding all atom PDB file.
;-----
; Citing this topology file
; ATB molid: 751
; ATB Topology Hash: 85039
;-----
; Final Topology Generation was performed using:
; A B3LYP/6-31G* optimized geometry.
; Bonded and van der Waals parameters were taken from the GROMOS 54A7 parameter set.
; Initial charges were estimated using the ESP method of Merz-Kollman.
; Final charges and charge groups were generated by method described in the ATB paper.
; If required, additional bonded parameters were generated from a Hessian matrix calculated at the B3LYP/6-31G* level of theory.
;-----
```

# A.1. itp files

## ■ Dioxido de Carbono ( $CO_2$ )

```
[ moleculetype ]
; Name nrexcl
co2 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_272 1 co2 O2 1 -0.374 15.9994
2 opls_271 1 co2 C1 1 0.748 12.0110
3 opls_272 1 co2 O1 1 -0.374 15.9994
; 0.000
; total charge of the molecule:
0.000
```

```
bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1170 2.4837e+07
2 3 2 0.1170 2.4837e+07
```

```
pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in
GROMOS itp
```

```
angles
; ai aj ak funct angle fc 1 2 3 2
180.00 500.00
```

```
dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc
```

```
dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
```

```
exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions
```

## ■ Ácido sulfhídrico ( $H_2S$ )

```
[ moleculetype ]
; Name nrexcl
h2s 3 [ atoms ] ; nr type resnr
resid atom cgnr charge mass
total_charge
1 opls_033 1 h2s H2 1 0.213 1.0080 2
opls_032 1 h2s S1 1 -0.426 32.0600
3 opls_033 1 h2s H1 1 0.213 1.0080 ;
0.000
; total charge of the molecule:
0.000
```

```
bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1350 2.6337e+06
2 3 2 0.1350 2.6337e+06
```

```
pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
```

```
angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 96.20 1215.03
```

```
dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
```

```
; ai aj ak al funct angle fc
dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions
```

## ■ Metano ( $CH_4$ )

```
[ atoms ]
; nr type resnr residue atom cgnr charge mass
typeB chargeB massB
; residue 1 CH4 rtp CH4 q 0.0
1 opls_138 1 CH4 C 1 -0.24 12.011 ; qtot -0.24
2 opls_140 1 CH4 H1 1 0.06 1.008 ; qtot -0.18
3 opls_140 1 CH4 H2 1 0.06 1.008 ; qtot -0.12
4 opls_140 1 CH4 H3 1 0.06 1.008 ; qtot -0.06
5 opls_140 1 CH4 H4 1 0.06 1.008 ; qtot 0
```

```
[ bonds ]
; ai aj funct c0 c1 c2 c3
1 2 1
1 3 1
1 4 1
1 5 1
```

```
[ angles ]
; ai aj ak funct c0 c1 c2 c3
2 1 3 1
2 1 4 1
2 1 5 1
3 1 4 1
3 1 5 1
4 1 5 1
```

```
[ moleculetype ]
; Name nrexcl
CH4 3
```

```
[ atoms ]
; nr type resnr residue atom cgnr
charge mass typeB chargeB massB
; residue 1 CH4 rtp CH4 q 0.0
1 opls_138 1 CH4 C 1 -0.24 12.011 ;
qtot -0.24
2 opls_140 1 CH4 H1 1 0.06 1.008 ;
qtot -0.18
3 opls_140 1 CH4 H2 1 0.06 1.008 ;
qtot -0.12
4 opls_140 1 CH4 H3 1 0.06 1.008 ;
qtot -0.06
5 opls_140 1 CH4 H4 1 0.06 1.008 ;
qtot 0
```

```
[ bonds ]
; ai aj funct c0 c1 c2 c3
1 2 1
1 3 1
1 4 1
1 5 1
```

```
[ angles ]
; ai aj ak funct c0 c1 c2 c3
2 1 3 1
2 1 4 1
2 1 5 1
3 1 4 1
3 1 5 1
4 1 5 1
```

## ■ Etano ( $C_2H_6$ )

```
moleculetype
; Name nrexcl
c2 3
atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
```

```
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_140 1 c2 H6 1 0.015 1.0080
2 opls_157 1 c2 C2 1 -0.045 12.0110
3 opls_140 1 c2 H4 1 0.015 1.0080
4 opls_140 1 c2 H5 1 0.015 1.0080
5 opls_157 1 c2 C1 1 -0.045 12.0110
6 opls_140 1 c2 H1 1 0.015 1.0080
7 opls_140 1 c2 H2 1 0.015 1.0080
8 opls_140 1 c2 H3 1 0.015 1.0080 ;
0.000
; total charge of the molecule:
0.000
```

```
bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1090 1.2300e+07
```

```
pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
```

```
1 6 1
1 7 1
1 8 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
```

```
angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.30 632.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.30 632.00
4 2 5 2 111.30 632.00
2 5 6 2 111.30 632.00
2 5 7 2 111.30 632.00
2 5 8 2 111.30 632.00
6 5 7 2 107.57 484.00
6 5 8 2 107.57 484.00
7 5 8 2 107.57 484.00
```

```
dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc
```

```
dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 6 1 0.00 5.92 3
```

```
exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions
```

## ■ Propano ( $C_3H_8$ )

```
moleculetype
; Name nrexcl
c3 3
atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
```

```

1 opsls_140 1 c3 H3 1 0.064 1.0080
2 opsls_157 1 c3 C1 1 -0.286 12.0110
3 opsls_140 1 c3 H1 1 0.064 1.0080
4 opsls_140 1 c3 H2 1 0.064 1.0080
5 opsls_158 1 c3 C2 1 0.260 12.0110
6 opsls_140 1 c3 H4 1 -0.036 1.0080
7 opsls_140 1 c3 H5 1 -0.036 1.0080 ;
0.094
8 opsls_157 1 c3 C3 2 -0.286 12.0110
9 opsls_140 1 c3 H6 2 0.064 1.0080
10 opsls_140 1 c3 H7 2 0.064 1.0080
11 opsls_140 1 c3 H8 2 0.064 1.0080 ;
-0.094
; total charge of the molecule:
0.000

```

bonds

```

; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1530 7.1500e+06
8 9 2 0.1090 1.2300e+07
8 10 2 0.1090 1.2300e+07
8 11 2 0.1090 1.2300e+07

```

pairs

```

; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1

```

angles

```

; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.60 507.00
1 2 4 2 107.60 507.00
1 2 5 2 111.40 532.00
3 2 4 2 107.60 507.00
3 2 5 2 111.40 532.00
4 2 5 2 111.40 532.00
2 5 6 2 109.50 618.00
2 5 7 2 109.50 618.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 109.50 618.00
7 5 8 2 109.50 618.00
5 8 9 2 111.40 532.00
5 8 10 2 111.40 532.00
5 8 11 2 111.40 532.00
9 8 10 2 107.60 507.00
9 8 11 2 107.60 507.00
10 8 11 2 107.60 507.00

```

dihedrals

```

; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

```

dihedrals

```

; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 9 1 0.00 5.92 3

```

clussions

```

; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

```

## ■ Isobutano ( $i-C_4H_{10}$ )

```

[ moleculetype ]
; Name nrexcl
ic4 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total.charge
1 opsls_140 1 ic4 H7 1 0.100 1.0080
2 opsls_157 1 ic4 C3 1 -0.446 12.0110
3 opsls_140 1 ic4 H5 1 0.100 1.0080
4 opsls_140 1 ic4 H6 1 0.100 1.0080 ;
-0.146
5 opsls_158 1 ic4 C2 2 0.484 12.0110
6 opsls_140 1 ic4 H4 2 -0.046 1.0080
7 opsls_157 1 ic4 C1 2 -0.446 12.0110
8 opsls_140 1 ic4 H1 2 0.100 1.0080
9 opsls_140 1 ic4 H2 2 0.100 1.0080
10 opsls_140 1 ic4 H3 2 0.100 1.0080
; 0.292
11 opsls_157 1 ic4 C4 3 -0.446
12.0110
12 opsls_140 1 ic4 H8 3 0.100 1.0080
13 opsls_140 1 ic4 H9 3 0.100 1.0080
14 opsls_140 1 ic4 H10 3 0.100 1.0080
; -0.146
; total charge of the molecule:
0.000

```

bonds

```

; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1100 3.0579e+06
5 7 2 0.1530 7.1500e+06
5 11 2 0.1530 7.1500e+06
7 8 2 0.1090 1.2300e+07
7 9 2 0.1090 1.2300e+07
7 10 2 0.1090 1.2300e+07
11 12 2 0.1090 1.2300e+07
11 13 2 0.1090 1.2300e+07
11 14 2 0.1090 1.2300e+07

```

pairs

```

; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 11 1
2 8 1
2 9 1
2 10 1
2 12 1
2 13 1
2 14 1
3 6 1
3 7 1
3 11 1
4 6 1
4 7 1
4 11 1
6 8 1
6 9 1
6 10 1
6 12 1
6 13 1
6 14 1
7 12 1
7 13 1
7 14 1
8 11 1
9 11 1
10 11 1

```

angles

```

; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.60 507.00
1 2 4 2 107.60 507.00
1 2 5 2 111.30 632.00
3 2 4 2 107.60 507.00
3 2 5 2 111.30 632.00
4 2 5 2 111.30 632.00

```

```

2 5 6 2 107.60 507.00
2 5 7 2 111.00 530.00
2 5 11 2 111.00 530.00
6 5 7 2 107.60 507.00
6 5 11 2 107.60 507.00
7 5 11 2 111.00 530.00
5 7 8 2 111.30 632.00
5 7 9 2 111.30 632.00
5 7 10 2 111.30 632.00
8 7 9 2 107.60 507.00
8 7 10 2 107.60 507.00
9 7 10 2 107.60 507.00
5 11 12 2 111.30 632.00
5 11 13 2 111.30 632.00
5 11 14 2 111.30 632.00
12 11 13 2 107.60 507.00
12 11 14 2 107.60 507.00
13 11 14 2 107.60 507.00

```

dihedrals

```

; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc
dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 7 1 0.00 5.92 3
2 5 7 8 1 0.00 5.92 3
7 5 11 12 1 0.00 5.92 3

```

clussions

```

; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

```

## ■ n-Butano ( $n-C_4H_{10}$ )

moleculetype

```

; Name nrexcl
nc4 3

```

atoms

```

; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total.charge
1 opsls_140 1 nc4 H7 1 0.079 1.0080
2 opsls_157 1 nc4 C1 1 -0.342 12.0110
3 opsls_140 1 nc4 H5 1 0.079 1.0080
4 opsls_140 1 nc4 H6 1 0.079 1.0080
5 opsls_158 1 nc4 C2 1 0.139 12.0110
6 opsls_140 1 nc4 H8 1 -0.017 1.0080
7 opsls_140 1 nc4 H9 1 -0.017 1.0080
; 0.000
8 opsls_158 1 nc4 C3 2 0.139 12.0110
9 opsls_140 1 nc4 H10 2 -0.017 1.0080
10 opsls_140 1 nc4 H11 2 -0.017
1.0080
11 opsls_157 1 nc4 C4 2 -0.342
12.0110
12 opsls_140 1 nc4 H12 2 0.079 1.0080
13 opsls_140 1 nc4 H13 2 0.079 1.0080
14 opsls_140 1 nc4 H14 2 0.079 1.0080
; -0.000
; total charge of the molecule:
-0.000

```

bonds

```

; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1530 7.1500e+06
8 9 2 0.1090 1.2300e+07
8 10 2 0.1090 1.2300e+07
8 11 2 0.1530 7.1500e+06
11 12 2 0.1090 1.2300e+07
11 13 2 0.1090 1.2300e+07
11 14 2 0.1090 1.2300e+07

```

```

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1

angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.60 507.00
1 2 4 2 107.60 507.00
1 2 5 2 111.40 532.00
3 2 4 2 107.60 507.00
3 2 5 2 111.40 532.00
4 2 5 2 111.40 532.00
2 5 6 2 109.50 618.00
2 5 7 2 109.50 618.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 109.50 618.00
7 5 8 2 109.50 618.00
5 8 9 2 109.50 618.00
5 8 10 2 109.50 618.00
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 109.50 618.00
10 8 11 2 109.50 618.00
8 11 12 2 111.40 532.00
8 11 13 2 111.40 532.00
8 11 14 2 111.40 532.00
12 11 13 2 107.60 507.00
12 11 14 2 107.60 507.00
13 11 14 2 107.60 507.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 12 1 0.00 5.92 3

exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
ic5 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls.140 1 ic5 H3 1 0.034 1.0080
2 opls.157 1 ic5 C1 1 -0.146 12.0110
3 opls.140 1 ic5 H1 1 0.034 1.0080
4 opls.140 1 ic5 H2 1 0.034 1.0080
5 opls.158 1 ic5 C4 1 0.078 12.0110
6 opls.140 1 ic5 H10 1 -0.017 1.0080
7 opls.140 1 ic5 H11 1 -0.017 1.0080
; 0.000
8 opls.158 1 ic5 C5 2 0.339 12.0110
9 opls.140 1 ic5 H12 2 -0.065 1.0080
10 opls.157 1 ic5 C2 2 -0.407
12.0110
11 opls.140 1 ic5 H4 2 0.090 1.0080
12 opls.140 1 ic5 H5 2 0.090 1.0080
13 opls.140 1 ic5 H6 2 0.090 1.0080
; 0.137
14 opls.157 1 ic5 C3 3 -0.407
12.0110
15 opls.140 1 ic5 H7 3 0.090 1.0080
16 opls.140 1 ic5 H8 3 0.090 1.0080
17 opls.140 1 ic5 H9 3 0.090 1.0080
; -0.137
; total charge of the molecule:
0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1540 4.0057e+06
8 9 2 0.1100 3.0579e+06
8 10 2 0.1530 7.1500e+06
8 14 2 0.1530 7.1500e+06
10 11 2 0.1090 1.2300e+07
10 12 2 0.1090 1.2300e+07
10 13 2 0.1090 1.2300e+07
14 15 2 0.1090 1.2300e+07
14 16 2 0.1090 1.2300e+07
14 17 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 14 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 11 1
5 12 1
5 13 1
5 15 1
5 16 1
5 17 1
6 9 1
6 10 1
6 14 1
7 9 1
7 10 1
7 14 1
9 11 1
9 12 1
9 13 1
9 15 1
9 16 1
9 17 1
10 15 1
10 16 1
10 17 1
11 14 1
12 14 1
13 14 1

angles
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 2 3 2 107.60 507.00
1 2 4 2 107.60 507.00
1 2 5 2 110.30 524.00
3 2 4 2 107.60 507.00
3 2 5 2 110.30 524.00
4 2 5 2 110.30 524.00
2 5 6 2 108.53 443.00
2 5 7 2 108.53 443.00
2 5 8 2 120.00 560.00
6 5 7 2 106.75 503.00
6 5 8 2 109.00 1680.51
7 5 8 2 109.00 1680.51
5 8 9 2 106.75 503.00
5 8 10 2 111.00 530.00
5 8 14 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 14 2 106.00 1733.55
10 8 14 2 111.00 530.00
8 10 11 2 111.30 632.00
8 10 12 2 111.30 632.00
8 10 13 2 111.30 632.00
11 10 12 2 107.60 507.00
11 10 13 2 107.60 507.00
12 10 13 2 107.60 507.00
8 14 15 2 111.30 632.00
8 14 16 2 111.30 632.00
8 14 17 2 111.30 632.00
15 14 16 2 107.60 507.00
15 14 17 2 107.60 507.00
16 14 17 2 107.60 507.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals

moleculetype
; Name nrexcl
nc5 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls.140 1 nc5 H3 1 0.052 1.0080
2 opls.157 1 nc5 C1 1 -0.222 12.0110
3 opls.140 1 nc5 H1 1 0.052 1.0080
4 opls.140 1 nc5 H2 1 0.052 1.0080
5 opls.158 1 nc5 C2 1 0.098 12.0110
6 opls.140 1 nc5 H4 1 -0.013 1.0080
7 opls.140 1 nc5 H5 1 -0.013 1.0080
8 opls.158 1 nc5 C3 1 -0.054 12.0110
9 opls.140 1 nc5 H6 1 0.021 1.0080
10 opls.140 1 nc5 H7 1 0.021 1.0080
; -0.006
11 opls.158 1 nc5 C4 2 0.098 12.0110
12 opls.140 1 nc5 H8 2 -0.013 1.0080
13 opls.140 1 nc5 H9 2 -0.013 1.0080
14 opls.157 1 nc5 C5 2 -0.222
12.0110
15 opls.140 1 nc5 H10 2 0.052 1.0080
16 opls.140 1 nc5 H11 2 0.052 1.0080
17 opls.140 1 nc5 H12 2 0.052 1.0080
; 0.006
; total charge of the molecule:
-0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1530 7.1500e+06
8 9 2 0.1100 1.2100e+07
8 10 2 0.1100 1.2100e+07
8 11 2 0.1530 7.1500e+06

```

## ■ n-Pentano ( $n-C_5H_{12}$ )

## ■ Isopentano ( $i-C_5H_{12}$ )

```

11 12 2 0.1090 1.2300e+07
11 13 2 0.1090 1.2300e+07
11 14 2 0.1530 7.1500e+06
14 15 2 0.1090 1.2300e+07
14 16 2 0.1090 1.2300e+07
14 17 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1

angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.60 507.00
1 2 4 2 107.60 507.00
1 2 5 2 111.40 532.00
3 2 4 2 107.60 507.00
3 2 5 2 111.40 532.00
4 2 5 2 111.40 532.00
2 5 6 2 109.50 618.00
2 5 7 2 109.50 618.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 109.00 1680.51
7 5 8 2 109.00 1680.51
5 8 9 2 109.00 1680.51
5 8 10 2 109.00 1680.51
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 109.00 1680.51
10 8 11 2 109.00 1680.51
8 11 12 2 109.00 1680.51
8 11 13 2 111.00 530.00
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 109.50 618.00
13 11 14 2 109.50 618.00
11 14 15 2 111.40 532.00
11 14 16 2 111.40 532.00
11 14 17 2 111.40 532.00
15 14 16 2 107.60 507.00
15 14 17 2 107.60 507.00
16 14 17 2 107.60 507.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3

clusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c6 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_140 1 c6 H3 1 0.067 1.0080
2 opls_157 1 c6 C1 1 -0.300 12.0110
3 opls_140 1 c6 H1 1 0.067 1.0080
4 opls_140 1 c6 H2 1 0.067 1.0080
5 opls_158 1 c6 C2 1 0.211 12.0110
6 opls_140 1 c6 H4 1 -0.035 1.0080
7 opls_140 1 c6 H5 1 -0.035 1.0080
8 opls_158 1 c6 C3 1 -0.062 12.0110
9 opls_140 1 c6 H6 1 0.010 1.0080
10 opls_140 1 c6 H7 1 0.010 1.0080 ;
0.000
11 opls_158 1 c6 C4 2 -0.062 12.0110
12 opls_140 1 c6 H8 2 0.010 1.0080
13 opls_140 1 c6 H9 2 0.010 1.0080
14 opls_158 1 c6 C5 2 0.211 12.0110
15 opls_140 1 c6 H10 2 -0.035 1.0080
16 opls_140 1 c6 H11 2 -0.035 1.0080
17 opls_157 1 c6 C6 2 -0.300 12.0110
18 opls_140 1 c6 H12 2 0.067 1.0080
19 opls_140 1 c6 H13 2 0.067 1.0080
20 opls_140 1 c6 H14 2 0.067 1.0080
; 0.000
; total charge of the molecule:
0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1530 7.1500e+06
8 9 2 0.1100 1.2100e+07
8 10 2 0.1100 1.2100e+07
8 11 2 0.1530 7.1500e+06
11 12 2 0.1100 1.2100e+07
11 13 2 0.1100 1.2100e+07
11 14 2 0.1530 7.1500e+06
14 15 2 0.1090 1.2300e+07
14 16 2 0.1090 1.2300e+07
14 17 2 0.1530 7.1500e+06
17 18 2 0.1090 1.2300e+07
17 19 2 0.1090 1.2300e+07
17 20 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1

clusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.00 530.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.00 530.00
4 2 5 2 111.00 530.00
2 5 6 2 109.50 618.00
2 5 7 2 109.50 618.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 109.00 1680.51
7 5 8 2 109.00 1680.51
5 8 9 2 109.00 1680.51
5 8 10 2 109.00 1680.51
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 109.50 618.00
10 8 11 2 109.50 618.00
8 11 12 2 109.50 618.00
8 11 13 2 109.50 618.00
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 109.00 1680.51
13 11 14 2 109.00 1680.51
11 14 15 2 109.00 1680.51
11 14 16 2 109.00 1680.51
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 109.50 618.00
16 14 17 2 109.50 618.00
14 17 18 2 111.00 530.00
14 17 19 2 111.00 530.00
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 107.57 484.00
18 17 20 2 107.57 484.00
19 17 20 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1

clusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

```

## ■ Hexano (C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>)

```

exclusions
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1

; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 21 1 0.00 5.92 3

clussions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c7 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_140 1 c7 H3 1 0.075 1.0080
2 opls_157 1 c7 C1 1 -0.331 12.0110
3 opls_140 1 c7 H1 1 0.075 1.0080
4 opls_140 1 c7 H2 1 0.075 1.0080
5 opls_158 1 c7 C2 1 0.174 12.0110
6 opls_140 1 c7 H4 1 -0.027 1.0080
7 opls_140 1 c7 H5 1 -0.027 1.0080 ;
0.014
8 opls_158 1 c7 C3 2 0.071 12.0110
9 opls_140 1 c7 H6 2 -0.015 1.0080
10 opls_140 1 c7 H7 2 -0.015 1.0080
11 opls_158 1 c7 C4 2 -0.140 12.0110
12 opls_140 1 c7 H8 2 0.015 1.0080
13 opls_140 1 c7 H9 2 0.015 1.0080
14 opls_158 1 c7 C5 2 0.071 12.0110
15 opls_140 1 c7 H10 2 -0.015 1.0080
16 opls_140 1 c7 H11 2 -0.015 1.0080
; -0.028
17 opls_158 1 c7 C6 3 0.174 12.0110
18 opls_140 1 c7 H12 3 -0.027 1.0080
19 opls_140 1 c7 H13 3 -0.027 1.0080
20 opls_157 1 c7 C7 3 -0.331 12.0110
21 opls_140 1 c7 H14 3 0.075 1.0080
22 opls_140 1 c7 H15 3 0.075 1.0080
23 opls_140 1 c7 H16 3 0.075 1.0080
; 0.014
; total charge of the molecule:
-0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1530 7.1500e+06
8 9 2 0.1100 1.2100e+07
8 10 2 0.1100 1.2100e+07
8 11 2 0.1530 7.1500e+06
11 12 2 0.1100 1.2100e+07
11 13 2 0.1100 1.2100e+07
11 14 2 0.1530 7.1500e+06
14 15 2 0.1100 1.2100e+07
14 16 2 0.1100 1.2100e+07
14 17 2 0.1530 7.1500e+06
17 18 2 0.1090 1.2300e+07
17 19 2 0.1090 1.2300e+07
17 20 2 0.1530 7.1500e+06
20 21 2 0.1090 1.2300e+07
20 22 2 0.1090 1.2300e+07
20 23 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1

angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.40 532.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.40 532.00
4 2 5 2 111.40 532.00
2 5 6 2 109.50 618.00
2 5 7 2 109.50 618.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 109.00 1680.51
7 5 8 2 109.00 1680.51
5 8 9 2 109.50 618.00
5 8 10 2 109.50 618.00
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 109.50 618.00
10 8 11 2 109.50 618.00
8 11 12 2 109.50 618.00
8 11 13 2 109.50 618.00
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.75 503.00
12 11 14 2 109.50 618.00
13 11 14 2 109.50 618.00
11 14 15 2 109.50 618.00
11 14 16 2 109.50 618.00
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 109.50 618.00
16 14 17 2 109.50 618.00
14 17 18 2 109.00 1680.51
14 17 19 2 109.00 1680.51
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 106.00 1733.55
18 17 20 2 109.50 618.00
19 17 20 2 109.50 618.00
17 20 21 2 111.40 532.00
17 20 22 2 111.40 532.00
17 20 23 2 111.40 532.00
21 20 22 2 107.57 484.00
21 20 23 2 107.57 484.00
22 20 23 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 21 1 0.00 5.92 3

clussions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c8 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_140 1 c8 H3 1 0.050 1.0080
2 opls_157 1 c8 C1 1 -0.233 12.0110
3 opls_140 1 c8 H1 1 0.050 1.0080
4 opls_140 1 c8 H2 1 0.050 1.0080
5 opls_158 1 c8 C2 1 0.152 12.0110
6 opls_140 1 c8 H4 1 -0.010 1.0080
7 opls_140 1 c8 H5 1 -0.010 1.0080 ;
0.049
8 opls_158 1 c8 C3 2 -0.226 12.0110
9 opls_140 1 c8 H6 2 0.054 1.0080
10 opls_140 1 c8 H7 2 0.054 1.0080
11 opls_158 1 c8 C4 2 0.015 12.0110
12 opls_140 1 c8 H8 2 0.027 1.0080
13 opls_140 1 c8 H9 2 0.027 1.0080 ;
-0.049
14 opls_158 1 c8 C5 3 0.015 12.0110
15 opls_140 1 c8 H10 3 0.027 1.0080
16 opls_140 1 c8 H11 3 0.027 1.0080
17 opls_158 1 c8 C6 3 -0.226 12.0110
18 opls_140 1 c8 H12 3 0.054 1.0080
19 opls_140 1 c8 H13 3 0.054 1.0080
; -0.049
20 opls_158 1 c8 C7 4 0.152 12.0110
21 opls_140 1 c8 H14 4 -0.010 1.0080
22 opls_140 1 c8 H15 4 -0.010 1.0080
23 opls_157 1 c8 C8 4 -0.233 12.0110
24 opls_140 1 c8 H16 4 0.050 1.0080
25 opls_140 1 c8 H17 4 0.050 1.0080
26 opls_140 1 c8 H18 4 0.050 1.0080
; 0.049
; total charge of the molecule:
-0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1540 4.2166e+06
8 9 2 0.1090 1.2300e+07
8 10 2 0.1090 1.2300e+07
8 11 2 0.1540 4.0057e+06
11 12 2 0.1090 1.2300e+07
11 13 2 0.1090 1.2300e+07
11 14 2 0.1530 7.1500e+06
14 15 2 0.1090 1.2300e+07
14 16 2 0.1090 1.2300e+07
14 17 2 0.1540 4.0057e+06
17 18 2 0.1090 1.2300e+07
17 19 2 0.1090 1.2300e+07

```

```

17 20 2 0.1540 4.2166e+06
20 21 2 0.1090 1.2300e+07
20 22 2 0.1090 1.2300e+07
20 23 2 0.1530 7.1500e+06
23 24 2 0.1090 1.2300e+07
23 25 2 0.1090 1.2300e+07
23 26 2 0.1090 1.2300e+07

pairs

; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1
17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1

angles

; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.60 507.00
1 2 4 2 107.60 507.00
1 2 5 2 111.00 530.00
3 2 4 2 107.60 507.00
3 2 5 2 111.00 530.00
4 2 5 2 111.00 530.00
2 5 6 2 108.00 465.00
2 5 7 2 108.00 465.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.75 503.00
6 5 8 2 108.53 443.00

7 5 8 2 108.53 443.00
5 8 9 2 108.53 443.00
5 8 10 2 108.53 443.00
5 8 11 2 120.00 560.00
9 8 10 2 106.75 503.00
9 8 11 2 109.50 618.00
10 8 11 2 109.50 618.00
8 11 12 2 107.57 484.00
8 11 13 2 107.57 484.00
8 11 14 2 120.00 560.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 109.00 1680.51
13 11 14 2 109.00 1680.51
11 14 15 2 109.00 1680.51
11 14 16 2 109.00 1680.51
11 14 17 2 120.00 560.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 107.57 484.00
16 14 17 2 107.57 484.00
14 17 18 2 109.50 618.00
14 17 19 2 109.50 618.00
14 17 20 2 120.00 560.00
18 17 19 2 106.75 503.00
18 17 20 2 108.53 443.00
19 17 20 2 108.53 443.00
17 20 21 2 108.53 443.00
17 20 22 2 108.53 443.00
17 20 23 2 111.00 530.00
21 20 22 2 106.75 503.00
21 20 23 2 108.00 465.00
22 20 23 2 108.00 465.00
20 23 24 2 111.00 530.00
20 23 25 2 111.00 530.00
20 23 26 2 111.00 530.00
24 23 25 2 107.60 507.00
24 23 26 2 107.60 507.00
25 23 26 2 107.60 507.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 180.00 1.00 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 180.00 1.00 3
17 20 23 24 1 0.00 5.92 3

exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c9 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_140 1 c9 H44 1 0.065 1.0080
2 opls_157 1 c9 C34 1 -0.286 12.0110
3 opls_140 1 c9 H40 1 0.065 1.0080
4 opls_140 1 c9 H42 1 0.065 1.0080
5 opls_158 1 c9 C28 1 0.176 12.0110
6 opls_140 1 c9 H36 1 -0.027 1.0080
7 opls_140 1 c9 H38 1 -0.027 1.0080
8 opls_158 1 c9 C1 1 -0.035 12.0110
9 opls_140 1 c9 H30 1 0.009 1.0080
10 opls_140 1 c9 H32 1 0.009 1.0080
; 0.014
11 opls_158 1 c9 C2 2 -0.075 12.0110
12 opls_140 1 c9 H16 2 0.011 1.0080
13 opls_140 1 c9 H18 2 0.011 1.0080

14 opls_158 1 c9 C4 2 0.134 12.0110
15 opls_140 1 c9 H20 2 -0.028 1.0080
16 opls_140 1 c9 H22 2 -0.028 1.0080
17 opls_158 1 c9 C6 2 -0.075 12.0110
18 opls_140 1 c9 H24 2 0.011 1.0080
19 opls_140 1 c9 H26 2 0.011 1.0080
; -0.028
20 opls_158 1 c9 C8 3 -0.035 12.0110
21 opls_140 1 c9 H241 3 0.009 1.0080
22 opls_140 1 c9 H261 3 0.009 1.0080
23 opls_158 1 c9 C22 3 0.176 12.0110
24 opls_140 1 c9 H48 3 -0.027 1.0080
25 opls_140 1 c9 H50 3 -0.027 1.0080
26 opls_157 1 c9 C46 3 -0.286
12.0110
27 opls_140 1 c9 H52 3 0.065 1.0080
28 opls_140 1 c9 H54 3 0.065 1.0080
29 opls_140 1 c9 H56 3 0.065 1.0080
; 0.014
; total charge of the molecule:
0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1530 7.1500e+06
8 9 2 0.1100 1.2100e+07
8 10 2 0.1100 1.2100e+07
8 11 2 0.1530 7.1500e+06
11 12 2 0.1100 1.2100e+07
11 13 2 0.1100 1.2100e+07
11 14 2 0.1530 7.1500e+06
14 15 2 0.1100 1.2100e+07
14 16 2 0.1100 1.2100e+07
14 17 2 0.1530 7.1500e+06
17 18 2 0.1100 1.2100e+07
17 19 2 0.1100 1.2100e+07
17 20 2 0.1530 7.1500e+06
20 21 2 0.1100 1.2100e+07
20 22 2 0.1100 1.2100e+07
20 23 2 0.1530 7.1500e+06
23 24 2 0.1090 1.2300e+07
23 25 2 0.1090 1.2300e+07
23 26 2 0.1530 7.1500e+06
26 27 2 0.1090 1.2300e+07
26 28 2 0.1090 1.2300e+07
26 29 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1
17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1

```

## ■ Nonano (C<sub>9</sub>H<sub>20</sub>)

```

11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1
17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
20 27 1
20 28 1
20 29 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1
24 27 1
24 28 1
24 29 1
25 27 1
25 28 1
25 29 1

24 23 25 2 106.00 1733.55
24 23 26 2 109.50 618.00
25 23 26 2 109.50 618.00
23 26 27 2 111.40 532.00
23 26 28 2 111.40 532.00
23 26 29 2 111.40 532.00
27 26 28 2 107.60 507.00
27 26 29 2 107.60 507.00
28 26 29 2 107.60 507.00

30 opls_l140 1 c10 H20 4 0.073 1.0080
31 opls_l140 1 c10 H21 4 0.073 1.0080
32 opls_l140 1 c10 H22 4 0.073 1.0080
; 0.019
; total charge of the molecule:
-0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1530 7.1500e+06
8 9 2 0.1100 1.2100e+07
8 10 2 0.1100 1.2100e+07
8 11 2 0.1530 7.1500e+06
11 12 2 0.1100 1.2100e+07
11 13 2 0.1100 1.2100e+07
11 14 2 0.1530 7.1500e+06
14 15 2 0.1100 1.2100e+07
14 16 2 0.1100 1.2100e+07
14 17 2 0.1530 7.1500e+06
17 18 2 0.1100 1.2100e+07
17 19 2 0.1100 1.2100e+07
17 20 2 0.1530 7.1500e+06
20 21 2 0.1100 1.2100e+07
20 22 2 0.1100 1.2100e+07
20 23 2 0.1530 7.1500e+06
23 24 2 0.1100 1.2100e+07
23 25 2 0.1100 1.2100e+07
23 26 2 0.1530 7.1500e+06
26 27 2 0.1090 1.2300e+07
26 28 2 0.1090 1.2300e+07
26 29 2 0.1530 7.1500e+06
29 30 2 0.1090 1.2300e+07
29 31 2 0.1090 1.2300e+07
29 32 2 0.1090 1.2300e+07

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 27 1 0.00 5.92 3

exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c10 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_l140 1 c10 H3 1 0.073 1.0080
2 opls_l157 1 c10 C1 1 -0.321 12.0110
3 opls_l140 1 c10 H1 1 0.073 1.0080
4 opls_l140 1 c10 H2 1 0.073 1.0080
5 opls_l158 1 c10 C2 1 0.179 12.0110
6 opls_l140 1 c10 H4 1 -0.029 1.0080
7 opls_l140 1 c10 H5 1 -0.029 1.0080
; 0.019
8 opls_l158 1 c10 C3 2 0.031 12.0110
9 opls_l140 1 c10 H6 2 -0.008 1.0080
10 opls_l140 1 c10 H7 2 -0.008 1.0080
11 opls_l158 1 c10 C4 2 -0.085
12.0110
12 opls_l140 1 c10 H8 2 0.004 1.0080
13 opls_l140 1 c10 H9 2 0.004 1.0080
14 opls_l158 1 c10 C5 2 0.093 12.0110
15 opls_l140 1 c10 H10 2 -0.025
1.0080
16 opls_l140 1 c10 H11 2 -0.025
1.0080 ; -0.019
17 opls_l158 1 c10 C6 3 0.093 12.0110
18 opls_l140 1 c10 H12 3 -0.025
1.0080
19 opls_l140 1 c10 H13 3 -0.025
1.0080
20 opls_l158 1 c10 C7 3 -0.085
12.0110
21 opls_l140 1 c10 H14 3 0.004 1.0080
22 opls_l140 1 c10 H15 3 0.004 1.0080
23 opls_l158 1 c10 C8 3 0.031 12.0110
24 opls_l140 1 c10 H16 3 -0.008
1.0080
25 opls_l140 1 c10 H17 3 -0.008
1.0080 ; -0.019
26 opls_l158 1 c10 C9 4 0.179 12.0110
27 opls_l140 1 c10 H18 4 -0.029
1.0080
28 opls_l140 1 c10 H19 4 -0.029
1.0080
29 opls_l157 1 c10 C10 4 -0.321
12.0110

angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.60 507.00
1 2 4 2 107.60 507.00
1 2 5 2 111.40 532.00
3 2 4 2 107.60 507.00
3 2 5 2 111.40 532.00
4 2 5 2 111.40 532.00
2 5 6 2 109.50 618.00
2 5 7 2 109.50 618.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 109.00 1680.51
7 5 8 2 109.00 1680.51
5 8 9 2 109.00 1680.51
5 8 10 2 109.00 1680.51
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 109.50 618.00
10 8 11 2 109.50 618.00
8 11 12 2 109.00 1680.51
8 11 13 2 109.00 1680.51
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 109.00 1680.51
13 11 14 2 109.00 1680.51
11 14 15 2 109.00 1680.51
11 14 16 2 109.00 1680.51
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 109.00 1680.51
16 14 17 2 109.00 1680.51
14 17 18 2 109.00 1680.51
14 17 19 2 109.00 1680.51
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 106.00 1733.55
18 17 20 2 109.00 1680.51
19 17 20 2 109.00 1680.51
17 20 21 2 109.50 618.00
17 20 22 2 109.50 618.00
17 20 23 2 111.00 530.00
21 20 22 2 106.00 1733.55
21 20 23 2 109.00 1680.51
22 20 23 2 109.00 1680.51
20 23 24 2 109.00 1680.51
20 23 25 2 109.00 1680.51
20 23 26 2 111.00 530.00

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1

```

■ Decano (C<sub>10</sub>H<sub>22</sub>)

```

15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1
17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
20 27 1
20 28 1
20 29 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1
23 30 1
23 31 1
23 32 1
24 27 1
24 28 1
24 29 1
25 27 1
25 28 1
25 29 1
27 30 1
27 31 1
27 32 1
28 30 1
28 31 1
28 32 1

```

```

23 26 27 2 109.00 1680.51
23 26 28 2 109.00 1680.51
23 26 29 2 111.00 530.00
27 26 28 2 106.00 1733.55
27 26 29 2 109.00 1680.51
28 26 29 2 109.00 1680.51
26 29 30 2 111.00 530.00
26 29 31 2 111.00 530.00
26 29 32 2 111.00 530.00
30 29 31 2 107.57 484.00
30 29 32 2 107.57 484.00
31 29 32 2 107.57 484.00

```

```

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

```

```

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 30 1 0.00 5.92 3

```

```

exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

```

```

2520.15307,1500e+06
5620.10901,2300e+07
5720.10901,2300e+07
5820.15307,1500e+06
8920.11001,2100e+07
81020.11001,2100e+07
81120.15307,1500e+06
111220.11001,2100e+07
111320.11001,2100e+07
111420.15307,1500e+06
141520.11001,2100e+07
141620.11001,2100e+07
141720.15307,1500e+06
171820.11001,2100e+07
171920.11001,2100e+07
172020.15307,1500e+06
202120.11001,2100e+07
202220.11001,2100e+07
202320.15307,1500e+06
232420.11001,2100e+07
232520.11001,2100e+07
232620.15307,1500e+06
262720.11001,2100e+07
262820.11001,2100e+07
262920.15307,1500e+06
293020.10901,2300e+07
293120.10901,2300e+07
293220.15307,1500e+06
323320.10901,2300e+07
323420.10901,2300e+07
323520.10901,2300e+07

```

pairs

```
:aiajfunct;all1-4pairsbuttheonesexcludedinGROMOSip
```

```

161
171
181
291
2101
2111
361
371
381
461
471
481
5121
5131
5141
691
6101
6111
791
7101
7111
8151
8161
8171
9121
9131
9141
10121
10131
10141
11181
11191
11201
12151
12161
12171
13151
13161
13171
14211
14221
14231
15181
15191
15201
16181
16191
16201
17241
17251
17261
18211
18221
18231
19211
19221
19231
20271
20281
20291
21241
21251
21261
22241
22251
22261
22271
22281
22291
23311
23321
23331
24271
24281
24291
25271
25281
25291
26331
26341
26351
27301
27311
27321
28301
28311
28321

```

## ■ Undecano (C<sub>11</sub>H<sub>24</sub>)

angles

```

; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.00 530.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.00 530.00
4 2 5 2 111.00 530.00
2 5 6 2 109.00 1680.51
2 5 7 2 109.00 1680.51
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 109.00 1680.51
7 5 8 2 109.00 1680.51
5 8 9 2 109.00 1680.51
5 8 10 2 109.00 1680.51
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 109.50 618.00
10 8 11 2 109.50 618.00
8 11 12 2 109.00 1680.51
8 11 13 2 109.00 1680.51
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 109.00 1680.51
13 11 14 2 109.00 1680.51
11 14 15 2 109.00 1680.51
11 14 16 2 109.00 1680.51
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 109.00 1680.51
16 14 17 2 109.00 1680.51
14 17 18 2 109.00 1680.51
14 17 19 2 109.00 1680.51
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 106.00 1733.55
18 17 20 2 109.00 1680.51
19 17 20 2 109.00 1680.51
17 20 21 2 109.00 1680.51
17 20 22 2 109.00 1680.51
17 20 23 2 111.00 530.00
21 20 22 2 106.00 1733.55
21 20 23 2 109.00 1680.51
22 20 23 2 109.00 1680.51
20 23 24 2 109.50 618.00
20 23 25 2 109.50 618.00
20 23 26 2 111.00 530.00
24 23 25 2 106.00 1733.55
24 23 26 2 109.00 1680.51
25 23 26 2 109.00 1680.51

```

```

moleculetype
; Name nrexcl
c11 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total/charge
10pls/1401c11H310,0661,0080
20pls/1571c11C11-0,28612,0110
30pls/1401c11H110,0661,0080
40pls/1401c11H210,0661,0080
50pls/1581c11C210,14812,0110
60pls/1401c11H41-0,0211,0080
70pls/1401c11H51-0,0211,0080
80pls/1581c11C310,00812,0110
90pls/1401c11H610,0021,0080
100pls/1401c11H710,0021,0080;0,030
110pls/1581c11C42-0,06912,0110
120pls/1401c11H820,0091,0080
130pls/1401c11H920,0091,0080
140pls/1581c11C520,03412,0110
150pls/1401c11H102-0,0101,0080
160pls/1401c11H112-0,0101,0080
170pls/1581c11C620,03012,0110
180pls/1401c11H122-0,0081,0080
190pls/1401c11H132-0,0081,0080;-0,023
200pls/1581c11C730,03412,0110
210pls/1401c11H143-0,0101,0080
220pls/1401c11H153-0,0101,0080
230pls/1581c11C83-0,06912,0110
240pls/1401c11H1630,0091,0080
250pls/1401c11H1730,0091,0080
260pls/1581c11C930,00812,0110
270pls/1401c11H1830,0021,0080
280pls/1401c11H1930,0021,0080;-0,025
290pls/1581c11C1040,14812,0110
300pls/1401c11H204-0,0211,0080
310pls/1401c11H214-0,0211,0080
320pls/1571c11C114-0,28612,0110
330pls/1401c11H2240,0661,0080
340pls/1401c11H2340,0661,0080
350pls/1401c11H2440,0661,0080;0,018
;totalchargeofthemolecule:0,000

bonds
:aiajfunct0c1
1220.10901,2300e+07
2320.10901,2300e+07
2420.10901,2300e+07

```

```

30331
30341
30351
31331
31341
31351
angles
;aiajakfunctanglefc
1232107,57484.00
1242107,57484.00
1252111,00530.00
3242107,57484.00
3252111,00530.00
4252111,00530.00
2562109,50618.00
2572109,50618.00
2582111,00530.00
6572106,75503.00
6582109,001680.51
7582109,001680.51
5892109,001680.51
58102109,001680.51
58112111,00530.00
98102106,001733.55
98112109,50618.00
108112109,50618.00
811122109,001680.51
811132109,001680.51
811142111,00530.00
1211132106,001733.55
1211142109,001680.51
1311142109,001680.51
1114152109,001680.51
1114162109,001680.51
1114172111,00530.00
1514162106,001733.55
1514172109,001680.51
1614172109,001680.51
1417182109,001680.51
1417192109,001680.51
1417202111,00530.00
1817192106,75503.00
1817202109,001680.51
1917202109,001680.51
1720212109,001680.51
1720222109,001680.51
1720232111,00530.00
2120222106,001733.55
2120232109,001680.51
2220232109,001680.51
2023242109,001680.51
2023252109,001680.51
2023262111,00530.00
2423252106,001733.55
2423262109,001680.51
2523262109,001680.51
2326272109,50618.00
2326282109,50618.00
2326292111,00530.00
2726282106,001733.55
2726292109,001680.51
2826292109,001680.51
2629302109,001680.51
2629312109,001680.51
2629322111,00530.00
3029312106,75503.00
3029322109,50618.00
3129322109,50618.00
2932332111,00530.00
2932342111,00530.00
2932352111,00530.00
3332342107,57484.00
3332352107,57484.00
3432352107,57484.00
dihedrals
;GROMOSimproperdihedrals
;aiajakfunctanglefc
dihedrals
;aiajakfunctph0cpmult
3258110,005,923
2581110,005,923
58111410,005,923
811141710,005,923
1114172010,005,923
1417202310,005,923
1720232610,005,923
2023262910,005,923
2326293210,005,923
2629323310,005,923
clussions
;aiajakfunct;GROMOS1-4exclusions
moleculetype
; Name nrexcl
c12 3
atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opl.s.140 1 c12 H3 1 0.068 1.0080
2 opl.s.157 1 c12 C1 1 -0.296 12.0110
3 opl.s.140 1 c12 H1 1 0.068 1.0080
4 opl.s.140 1 c12 H2 1 0.068 1.0080
5 opl.s.158 1 c12 C2 1 0.164 12.0110
6 opl.s.140 1 c12 H4 1 -0.024 1.0080
7 opl.s.140 1 c12 H5 1 -0.024 1.0080
8 opl.s.158 1 c12 C3 1 -0.013 12.0110
9 opl.s.140 1 c12 H6 1 0.006 1.0080
10 opl.s.140 1 c12 H7 1 0.006 1.0080
; 0.023
11 opl.s.158 1 c12 C4 2 -0.080
12.0110
12 opl.s.140 1 c12 H8 2 0.011 1.0080
13 opl.s.140 1 c12 H9 2 0.011 1.0080
14 opl.s.158 1 c12 C5 2 0.093 12.0110
15 opl.s.140 1 c12 H10 2 -0.021
1.0080
16 opl.s.140 1 c12 H11 2 -0.021
1.0080
17 opl.s.158 1 c12 C6 2 -0.016
12.0110
18 opl.s.140 1 c12 H12 2 -0.000
1.0080
19 opl.s.140 1 c12 H13 2 -0.000
1.0080 ; -0.023
20 opl.s.158 1 c12 C7 3 -0.016
12.0110
21 opl.s.140 1 c12 H14 3 -0.000
1.0080
22 opl.s.140 1 c12 H15 3 -0.000
1.0080
23 opl.s.158 1 c12 C8 3 0.093 12.0110
24 opl.s.140 1 c12 H16 3 -0.021
1.0080
25 opl.s.140 1 c12 H17 3 -0.021
1.0080
26 opl.s.158 1 c12 C9 3 -0.080
12.0110
27 opl.s.140 1 c12 H18 3 0.011 1.0080
28 opl.s.140 1 c12 H19 3 0.011 1.0080
; -0.023
29 opl.s.158 1 c12 C10 4 -0.013
12.0110
30 opl.s.140 1 c12 H20 4 0.006 1.0080
31 opl.s.140 1 c12 H21 4 0.006 1.0080
32 opl.s.158 1 c12 C11 4 0.164
12.0110
33 opl.s.140 1 c12 H22 4 -0.024
1.0080
34 opl.s.140 1 c12 H23 4 -0.024
1.0080
35 opl.s.157 1 c12 C12 4 -0.296
12.0110
36 opl.s.140 1 c12 H24 4 0.068 1.0080
37 opl.s.140 1 c12 H25 4 0.068 1.0080
38 opl.s.140 1 c12 H26 4 0.068 1.0080
; 0.023
; total charge of the molecule:
0.000
pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1
17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
20 27 1
20 28 1
20 29 1
21 24 1
21 25 1

```

■ Dodecano (C<sub>12</sub>H<sub>26</sub>)

```

21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1
23 30 1
23 31 1
23 32 1
24 27 1
24 28 1
24 29 1
25 27 1
25 28 1
25 29 1
26 33 1
26 34 1
26 35 1
27 30 1
27 31 1
27 32 1
28 30 1
28 31 1
28 32 1
29 36 1
29 37 1
29 38 1
30 33 1
30 34 1
30 35 1
31 33 1
31 34 1
31 35 1
33 36 1
33 37 1
33 38 1
34 36 1
34 37 1
34 38 1

angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.00 530.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.00 530.00
4 2 5 2 111.00 530.00
2 5 6 2 109.50 618.00
2 5 7 2 109.50 618.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 109.00 1680.51
7 5 8 2 109.00 1680.51
5 8 9 2 109.00 1680.51
5 8 10 2 109.00 1680.51
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 109.50 618.00
10 8 11 2 109.50 618.00
8 11 12 2 109.00 1680.51
8 11 13 2 109.00 1680.51
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 109.00 1680.51
13 11 14 2 109.00 1680.51
11 14 15 2 109.00 1680.51
11 14 16 2 109.00 1680.51
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 109.00 1680.51
16 14 17 2 109.00 1680.51
14 17 18 2 109.00 1680.51
14 17 19 2 109.00 1680.51
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 106.00 1733.55
18 17 20 2 109.00 1680.51
19 17 20 2 109.00 1680.51
17 20 21 2 109.00 1680.51
17 20 22 2 109.00 1680.51
17 20 23 2 111.00 530.00
21 20 22 2 106.00 1733.55
21 20 23 2 109.00 1680.51
22 20 23 2 109.00 1680.51
20 23 24 2 109.00 1680.51
20 23 25 2 109.00 1680.51
20 23 26 2 111.00 530.00
24 23 25 2 106.00 1733.55
24 23 26 2 109.00 1680.51
25 23 26 2 109.00 1680.51

23 26 27 2 109.00 1680.51
23 26 28 2 109.00 1680.51
23 26 29 2 111.00 530.00
27 26 28 2 106.00 1733.55
27 26 29 2 109.00 1680.51
28 26 29 2 109.00 1680.51
26 29 30 2 109.50 618.00
26 29 31 2 109.50 618.00
26 29 32 2 111.00 530.00
30 29 31 2 106.00 1733.55
30 29 32 2 109.00 1680.51
31 29 32 2 109.00 1680.51
29 32 33 2 109.00 1680.51
29 32 34 2 109.00 1680.51
29 32 35 2 111.00 530.00
33 32 34 2 106.00 1733.55
33 32 35 2 109.50 618.00
34 32 35 2 109.50 618.00
32 35 36 2 111.00 530.00
32 35 37 2 111.00 530.00
32 35 38 2 111.00 530.00
36 35 37 2 107.57 484.00
36 35 38 2 107.57 484.00
37 35 38 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 36 1 0.00 5.92 3

exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c13 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_140 1 c13 H3 1 0.068 1.0080
2 opls_157 1 c13 C1 1 -0.298 12.0110
3 opls_140 1 c13 H1 1 0.068 1.0080
4 opls_140 1 c13 H2 1 0.068 1.0080
5 opls_158 1 c13 C2 1 0.162 12.0110
6 opls_140 1 c13 H4 1 -0.024 1.0080
7 opls_140 1 c13 H5 1 -0.024 1.0080
; 0.020
8 opls_158 1 c13 C3 2 0.008 12.0110
9 opls_140 1 c13 H6 2 0.002 1.0080
10 opls_140 1 c13 H7 2 0.002 1.0080
11 opls_158 1 c13 C4 2 -0.106
12.0110
12 opls_140 1 c13 H8 2 0.016 1.0080
13 opls_140 1 c13 H9 2 0.016 1.0080
14 opls_158 1 c13 C5 2 0.083 12.0110
15 opls_140 1 c13 H10 2 -0.018
1.0080
16 opls_140 1 c13 H11 2 -0.018
1.0080 ; -0.015
17 opls_158 1 c13 C6 3 0.044 12.0110
18 opls_140 1 c13 H12 3 -0.011
1.0080

19 opls_140 1 c13 H13 3 -0.011
1.0080
20 opls_158 1 c13 C7 3 -0.070
12.0110
21 opls_140 1 c13 H14 3 0.008 1.0080
22 opls_140 1 c13 H15 3 0.008 1.0080
23 opls_158 1 c13 C8 3 0.044 12.0110
24 opls_140 1 c13 H16 3 -0.011
1.0080
25 opls_140 1 c13 H17 3 -0.011
1.0080 ; -0.010
26 opls_158 1 c13 C9 4 0.083 12.0110
27 opls_140 1 c13 H18 4 -0.018
1.0080
28 opls_140 1 c13 H19 4 -0.018
1.0080
29 opls_158 1 c13 C10 4 -0.106
12.0110
30 opls_140 1 c13 H20 4 0.016 1.0080
31 opls_140 1 c13 H21 4 0.016 1.0080
32 opls_158 1 c13 C11 4 0.008
12.0110
33 opls_140 1 c13 H22 4 0.002 1.0080
34 opls_140 1 c13 H23 4 0.002 1.0080
; -0.015
35 opls_158 1 c13 C12 5 0.162
12.0110
36 opls_140 1 c13 H24 5 -0.024
1.0080
37 opls_140 1 c13 H25 5 -0.024
1.0080
38 opls_157 1 c13 C13 5 -0.298
12.0110
39 opls_140 1 c13 H26 5 0.068 1.0080
40 opls_140 1 c13 H27 5 0.068 1.0080
41 opls_140 1 c13 H28 5 0.068 1.0080
; 0.020
; total charge of the molecule:
0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1530 7.1500e+06
8 9 2 0.1100 1.2100e+07
8 10 2 0.1100 1.2100e+07
8 11 2 0.1530 7.1500e+06
11 12 2 0.1100 1.2100e+07
11 13 2 0.1100 1.2100e+07
11 14 2 0.1530 7.1500e+06
14 15 2 0.1100 1.2100e+07
14 16 2 0.1100 1.2100e+07
14 17 2 0.1530 7.1500e+06
17 18 2 0.1100 1.2100e+07
17 19 2 0.1100 1.2100e+07
17 20 2 0.1530 7.1500e+06
20 21 2 0.1100 1.2100e+07
20 22 2 0.1100 1.2100e+07
20 23 2 0.1530 7.1500e+06
23 24 2 0.1100 1.2100e+07
23 25 2 0.1100 1.2100e+07
23 26 2 0.1530 7.1500e+06
26 27 2 0.1100 1.2100e+07
26 28 2 0.1100 1.2100e+07
26 29 2 0.1530 7.1500e+06
29 30 2 0.1100 1.2100e+07
29 31 2 0.1100 1.2100e+07
29 32 2 0.1530 7.1500e+06
32 33 2 0.1100 1.2100e+07
32 34 2 0.1100 1.2100e+07
32 35 2 0.1530 7.1500e+06
35 36 2 0.1090 1.2300e+07
35 37 2 0.1090 1.2300e+07
35 38 2 0.1530 7.1500e+06
38 39 2 0.1090 1.2300e+07
38 40 2 0.1090 1.2300e+07
38 41 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1

```

■ Tridecano ( $C_{13}H_{28}$ )

```

1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1
17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
20 27 1
20 28 1
20 29 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1
23 30 1
23 31 1
23 32 1
24 27 1
24 28 1
24 29 1
25 27 1
25 28 1
25 29 1
26 33 1
26 34 1
26 35 1
27 30 1
27 31 1
27 32 1
28 30 1
28 31 1
28 32 1
29 36 1
29 37 1
29 38 1
30 33 1
30 34 1
30 35 1
31 33 1

31 34 1
31 35 1
32 39 1
32 40 1
32 41 1
33 36 1
33 37 1
33 38 1
34 36 1
34 37 1
34 38 1
36 39 1
36 40 1
36 41 1
37 39 1
37 40 1
37 41 1

angles
; ai aj ak al funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.40 532.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.40 532.00
4 2 5 2 111.40 532.00
2 5 6 2 109.50 285.00
2 5 7 2 109.50 285.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 109.00 1680.51
7 5 8 2 109.00 1680.51
5 8 9 2 109.00 1680.51
5 8 10 2 109.00 1680.51
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 109.50 285.00
10 8 11 2 109.50 285.00
8 11 12 2 109.00 1680.51
8 11 13 2 109.00 1680.51
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 109.00 1680.51
13 11 14 2 109.00 1680.51
11 14 15 2 109.00 1680.51
11 14 16 2 109.00 1680.51
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 109.00 1680.51
16 14 17 2 109.00 1680.51
14 17 18 2 109.00 1680.51
14 17 19 2 109.00 1680.51
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 106.00 1733.55
18 17 20 2 109.00 1680.51
19 17 20 2 109.00 1680.51
17 20 21 2 109.00 1680.51
17 20 22 2 109.00 1680.51
17 20 23 2 111.00 530.00
21 20 22 2 106.00 1733.55
21 20 23 2 109.00 1680.51
22 20 23 2 109.00 1680.51
20 23 24 2 109.00 1680.51
20 23 25 2 109.00 1680.51
20 23 26 2 111.00 530.00
24 23 25 2 106.00 1733.55
24 23 26 2 109.00 1680.51
25 23 26 2 109.00 1680.51
23 26 27 2 109.00 1680.51
23 26 28 2 109.00 1680.51
23 26 29 2 111.00 530.00
27 26 28 2 106.00 1733.55
27 26 29 2 109.00 1680.51
28 26 29 2 109.00 1680.51
26 29 30 2 109.00 1680.51
26 29 31 2 109.00 1680.51
26 29 32 2 111.00 530.00
30 29 31 2 106.00 1733.55
30 29 32 2 109.00 1680.51
31 29 32 2 109.00 1680.51
29 32 33 2 109.50 285.00
29 32 34 2 109.50 285.00
29 32 35 2 111.00 530.00
33 32 34 2 106.00 1733.55
33 32 35 2 109.00 1680.51
34 32 35 2 109.00 1680.51
32 35 36 2 109.00 1680.51
32 35 37 2 109.00 1680.51

32 35 38 2 111.00 530.00
36 35 37 2 106.00 1733.55
36 35 38 2 109.50 285.00
37 35 38 2 109.50 285.00
35 38 39 2 111.40 532.00
35 38 40 2 111.40 532.00
35 38 41 2 111.40 532.00
39 38 40 2 107.57 484.00
39 38 41 2 107.57 484.00
40 38 41 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 39 1 0.00 5.92 3

exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c14 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opl.s.140 1 c14 H3Z 1 0.086 1.0080
2 opl.s.157 1 c14 C37 1 -0.367
12.0110
3 opl.s.140 1 c14 H3X 1 0.086 1.0080
4 opl.s.140 1 c14 H3Y 1 0.086 1.0080
5 opl.s.158 1 c14 C38 1 0.167 12.0110
6 opl.s.140 1 c14 H4X 1 -0.004 1.0080
7 opl.s.140 1 c14 H4Y 1 -0.004 1.0080
; 0.050
8 opl.s.158 1 c14 C39 2 -0.066
12.0110
9 opl.s.140 1 c14 H5X 2 0.016 1.0080
10 opl.s.140 1 c14 H5Y 2 0.016 1.0080
11 opl.s.158 1 c14 C40 2 -0.050
12.0110
12 opl.s.140 1 c14 H6X 2 0.022 1.0080
13 opl.s.140 1 c14 H6Y 2 0.022 1.0080
; -0.040
14 opl.s.158 1 c14 C41 3 -0.105
12.0110
15 opl.s.140 1 c14 H7X 3 0.029 1.0080
16 opl.s.140 1 c14 H7Y 3 0.029 1.0080
17 opl.s.158 1 c14 C42 3 0.096
12.0110
18 opl.s.140 1 c14 H8X 3 -0.020
1.0080
19 opl.s.140 1 c14 H8Y 3 -0.020
1.0080
20 opl.s.158 1 c14 C43 3 -0.025
12.0110
21 opl.s.140 1 c14 H9X 3 0.003 1.0080
22 opl.s.140 1 c14 H9Y 3 0.003 1.0080
; -0.010
23 opl.s.158 1 c14 C44 4 -0.025
12.0110
24 opl.s.140 1 c14 H10X 4 0.003

```

## ■ Tetradecano (C<sub>14</sub>H<sub>30</sub>)

```

1.0080
25 opls_140 1 c14 H10Y 4 0.003
1.0080 ; -0.019
26 opls_158 1 c14 C45 5 0.096
12.0110
27 opls_140 1 c14 H11X 5 -0.020
1.0080
28 opls_140 1 c14 H11Y 5 -0.020
1.0080
29 opls_158 1 c14 C46 5 -0.105
12.0110
30 opls_140 1 c14 H12X 5 0.029
1.0080
31 opls_140 1 c14 H12Y 5 0.029
1.0080 ; 0.009
32 opls_158 1 c14 C47 6 -0.050
12.0110
33 opls_140 1 c14 H13X 6 0.022
1.0080
34 opls_140 1 c14 H13Y 6 0.022
1.0080 ; -0.006
35 opls_158 1 c14 C48 7 -0.066
12.0110
36 opls_140 1 c14 H14X 7 0.016
1.0080
37 opls_140 1 c14 H14Y 7 0.016
1.0080
38 opls_158 1 c14 C49 7 0.167
12.0110
39 opls_140 1 c14 H15X 7 -0.004
1.0080
40 opls_140 1 c14 H15Y 7 -0.004
1.0080
41 opls_157 1 c14 C50 7 -0.367
12.0110
42 opls_140 1 c14 H16X 7 0.086
1.0080
43 opls_140 1 c14 H16Y 7 0.086
1.0080
44 opls_140 1 c14 H16Z 7 0.086
1.0080 ; 0.016
; total charge of the molecule:
-0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1530 7.1500e+06
8 9 2 0.1090 1.2300e+07
8 10 2 0.1090 1.2300e+07
8 11 2 0.1540 4.2166e+06
11 12 2 0.1090 1.2300e+07
11 13 2 0.1090 1.2300e+07
11 14 2 0.1540 4.2166e+06
14 15 2 0.1090 1.2300e+07
14 16 2 0.1090 1.2300e+07
14 17 2 0.1530 7.1500e+06
17 18 2 0.1090 1.2300e+07
17 19 2 0.1090 1.2300e+07
17 20 2 0.1530 7.1500e+06
20 21 2 0.1090 1.2300e+07
20 22 2 0.1090 1.2300e+07
20 23 2 0.1530 7.1500e+06
23 24 2 0.1090 1.2300e+07
23 25 2 0.1090 1.2300e+07
23 26 2 0.1530 7.1500e+06
26 27 2 0.1090 1.2300e+07
26 28 2 0.1090 1.2300e+07
26 29 2 0.1530 7.1500e+06
29 30 2 0.1090 1.2300e+07
29 31 2 0.1090 1.2300e+07
29 32 2 0.1540 4.2166e+06
32 33 2 0.1090 1.2300e+07
32 34 2 0.1090 1.2300e+07
32 35 2 0.1540 4.2166e+06
35 36 2 0.1090 1.2300e+07
35 37 2 0.1090 1.2300e+07
35 38 2 0.1530 7.1500e+06
38 39 2 0.1090 1.2300e+07
38 40 2 0.1090 1.2300e+07
38 41 2 0.1530 7.1500e+06
41 42 2 0.1090 1.2300e+07
41 43 2 0.1090 1.2300e+07
41 44 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1
17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
20 27 1
20 28 1
20 29 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1
23 30 1
23 31 1
23 32 1
24 27 1
24 28 1
24 29 1
25 27 1
25 28 1
25 29 1
26 33 1
26 34 1
26 35 1
27 30 1
27 31 1
27 32 1
28 30 1
28 31 1
28 32 1
29 36 1

angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.30 632.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.30 632.00
4 2 5 2 111.30 632.00
2 5 6 2 109.00 1680.51
2 5 7 2 109.00 1680.51
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 110.00 4763.46
7 5 8 2 110.00 4763.46
5 8 9 2 108.53 443.00
5 8 10 2 108.53 443.00
5 8 11 2 120.00 560.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 109.00 1680.51
10 8 11 2 109.00 1680.51
8 11 12 2 107.57 484.00
8 11 13 2 107.57 484.00
8 11 14 2 120.00 560.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 110.00 4763.46
13 11 14 2 110.00 4763.46
11 14 15 2 109.00 1680.51
11 14 16 2 109.00 1680.51
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 107.60 507.00
16 14 17 2 107.60 507.00
14 17 18 2 108.53 443.00
14 17 19 2 108.53 443.00
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 106.00 1733.55
18 17 20 2 108.53 443.00
19 17 20 2 108.53 443.00
17 20 21 2 110.00 4763.46
17 20 22 2 110.00 4763.46
17 20 23 2 111.00 530.00
21 20 22 2 106.00 1733.55
21 20 23 2 109.00 1680.51
22 20 23 2 109.00 1680.51
20 23 24 2 109.00 1680.51
20 23 25 2 109.00 1680.51
20 23 26 2 111.00 530.00
24 23 25 2 106.00 1733.55
24 23 26 2 110.00 4763.46
25 23 26 2 110.00 4763.46
23 26 27 2 108.53 443.00
23 26 28 2 108.53 443.00
23 26 29 2 111.00 530.00
27 26 28 2 106.00 1733.55
27 26 29 2 108.53 443.00

```

```

28 26 29 2 108.53 443.00
26 29 30 2 107.60 507.00
26 29 31 2 107.60 507.00
26 29 32 2 111.00 530.00
30 29 31 2 106.00 1733.55
30 29 32 2 109.00 1680.51
31 29 32 2 109.00 1680.51
29 32 33 2 110.00 4763.46
29 32 34 2 110.00 4763.46
29 32 35 2 120.00 560.00
33 32 34 2 106.00 1733.55
33 32 35 2 107.57 484.00
34 32 35 2 107.57 484.00
32 35 36 2 109.00 1680.51
32 35 37 2 109.00 1680.51
32 35 38 2 120.00 560.00
36 35 37 2 106.00 1733.55
36 35 38 2 108.53 443.00
37 35 38 2 108.53 443.00
35 38 39 2 110.00 4763.46
35 38 40 2 110.00 4763.46
35 38 41 2 111.00 530.00
39 38 40 2 106.00 1733.55
39 38 41 2 109.00 1680.51
40 38 41 2 109.00 1680.51
38 41 42 2 111.30 632.00
38 41 43 2 111.30 632.00
38 41 44 2 111.30 632.00
42 41 43 2 107.57 484.00
42 41 44 2 107.57 484.00
43 41 44 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 180.00 1.00 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 42 1 0.00 5.92 3

exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1530 7.1500e+06
8 9 2 0.1100 1.2100e+07
8 10 2 0.1100 1.2100e+07
8 11 2 0.1530 7.1500e+06
11 12 2 0.1100 1.2100e+07
11 13 2 0.1100 1.2100e+07
11 14 2 0.1530 7.1500e+06
14 15 2 0.1100 1.2100e+07
14 16 2 0.1100 1.2100e+07
14 17 2 0.1530 7.1500e+06
17 18 2 0.1100 1.2100e+07
17 19 2 0.1100 1.2100e+07
17 20 2 0.1530 7.1500e+06
20 21 2 0.1100 1.2100e+07
20 22 2 0.1100 1.2100e+07
20 23 2 0.1530 7.1500e+06
23 24 2 0.1100 1.2100e+07
23 25 2 0.1100 1.2100e+07
23 26 2 0.1530 7.1500e+06
26 27 2 0.1100 1.2100e+07
26 28 2 0.1100 1.2100e+07

moleculetype
; Name nrexcl
c15 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_l40 1 c15 H3 1 0.067 1.0080
2 opls_l57 1 c15 C1 1 -0.292 12.0110
3 opls_l40 1 c15 H1 1 0.067 1.0080
4 opls_l40 1 c15 H2 1 0.067 1.0080
5 opls_l58 1 c15 C2 1 0.160 12.0110
6 opls_l40 1 c15 H4 1 -0.023 1.0080
7 opls_l40 1 c15 H5 1 -0.023 1.0080
; 0.023
8 opls_l58 1 c15 C3 2 -0.005 12.0110
9 opls_l40 1 c15 H6 2 0.005 1.0080
10 opls_l40 1 c15 H7 2 0.005 1.0080
11 opls_l58 1 c15 C4 2 -0.084
12.0110
12 opls_l40 1 c15 H8 2 0.012 1.0080
13 opls_l40 1 c15 H9 2 0.012 1.0080
14 opls_l58 1 c15 C5 2 0.079 12.0110
15 opls_l40 1 c15 H10 2 -0.018
1.0080
16 opls_l40 1 c15 H11 2 -0.018
1.0080 ; -0.012
17 opls_l58 1 c15 C6 3 0.007 12.0110
18 opls_l40 1 c15 H12 3 -0.004
1.0080
19 opls_l40 1 c15 H13 3 -0.004
1.0080
20 opls_l58 1 c15 C7 3 -0.021
12.0110
21 opls_l40 1 c15 H14 3 0.000 1.0080
22 opls_l40 1 c15 H15 3 0.000 1.0080
23 opls_l58 1 c15 C8 3 0.048 12.0110
24 opls_l40 1 c15 H16 3 -0.013
1.0080
25 opls_l40 1 c15 H17 3 -0.013
1.0080 ; 0.000
26 opls_l58 1 c15 C9 4 -0.021
12.0110
27 opls_l40 1 c15 H18 4 0.000 1.0080
28 opls_l40 1 c15 H19 4 0.000 1.0080
29 opls_l58 1 c15 C10 4 0.007
12.0110
30 opls_l40 1 c15 H20 4 -0.004
1.0080
31 opls_l40 1 c15 H21 4 -0.004
1.0080 ; -0.022
32 opls_l58 1 c15 C11 5 0.079
12.0110
33 opls_l40 1 c15 H22 5 -0.018
1.0080
34 opls_l40 1 c15 H23 5 -0.018
1.0080
35 opls_l58 1 c15 C12 5 -0.084
12.0110
36 opls_l40 1 c15 H24 5 0.012 1.0080
37 opls_l40 1 c15 H25 5 0.012 1.0080
38 opls_l58 1 c15 C13 5 -0.005
12.0110
39 opls_l40 1 c15 H26 5 0.005 1.0080
40 opls_l40 1 c15 H27 5 0.005 1.0080
; -0.012
41 opls_l58 1 c15 C14 6 0.160
12.0110
42 opls_l40 1 c15 H28 6 -0.023
1.0080
43 opls_l40 1 c15 H29 6 -0.023
1.0080
44 opls_l57 1 c15 C15 6 -0.292
12.0110
45 opls_l40 1 c15 H30 6 0.067 1.0080
46 opls_l40 1 c15 H31 6 0.067 1.0080
47 opls_l40 1 c15 H32 6 0.067 1.0080
; 0.023
; total charge of the molecule:
0.000

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1
17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
20 27 1
20 28 1
20 29 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1

```

## ■ Pentadecano ( $C_{15}H_{32}$ )

```

22 26 1
23 30 1
23 31 1
23 32 1
24 27 1
24 28 1
24 29 1
25 27 1
25 28 1
25 29 1
26 33 1
26 34 1
26 35 1
27 30 1
27 31 1
27 32 1
28 30 1
28 31 1
28 32 1
29 36 1
29 37 1
29 38 1
30 33 1
30 34 1
30 35 1
31 33 1
31 34 1
31 35 1
32 39 1
32 40 1
32 41 1
33 36 1
33 37 1
33 38 1
34 36 1
34 37 1
34 38 1
35 42 1
35 43 1
35 44 1
36 39 1
36 40 1
36 41 1
37 39 1
37 40 1
37 41 1
38 45 1
38 46 1
38 47 1
39 42 1
39 43 1
39 44 1
40 42 1
40 43 1
40 44 1
42 45 1
42 46 1
42 47 1
43 45 1
43 46 1
43 47 1

```

```

; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.40 532.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.40 532.00
4 2 5 2 111.40 532.00
2 5 6 2 109.50 285.00
2 5 7 2 109.50 285.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 109.00 1680.51
7 5 8 2 109.00 1680.51
5 8 9 2 109.00 1680.51
5 8 10 2 109.00 1680.51
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 109.50 285.00
10 8 11 2 109.50 285.00
8 11 12 2 109.00 1680.51
8 11 13 2 109.00 1680.51
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 109.00 1680.51
13 11 14 2 109.00 1680.51

```

```

; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

```

```

11 14 15 2 109.00 1680.51
11 14 16 2 109.00 1680.51
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 109.00 1680.51
16 14 17 2 109.00 1680.51
14 17 18 2 109.00 1680.51
14 17 19 2 109.00 1680.51
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 106.00 1733.55
18 17 20 2 109.00 1680.51
19 17 20 2 109.00 1680.51
17 20 21 2 109.00 1680.51
17 20 22 2 109.00 1680.51
17 20 23 2 111.00 530.00
21 20 22 2 106.00 1733.55
21 20 23 2 109.00 1680.51
22 20 23 2 109.00 1680.51
20 23 24 2 109.00 1680.51
20 23 25 2 109.00 1680.51
20 23 26 2 111.00 530.00
24 23 25 2 106.00 1733.55
24 23 26 2 109.00 1680.51
25 23 26 2 109.00 1680.51
23 26 27 2 109.00 1680.51
23 26 28 2 109.00 1680.51
23 26 29 2 111.00 530.00
27 26 28 2 106.00 1733.55
27 26 29 2 109.00 1680.51
28 26 29 2 109.00 1680.51
26 29 30 2 109.00 1680.51
26 29 31 2 109.00 1680.51
26 29 32 2 111.00 530.00
30 29 31 2 106.00 1733.55
30 29 32 2 109.00 1680.51
31 29 32 2 109.00 1680.51
29 32 33 2 109.00 1680.51
29 32 34 2 109.00 1680.51
29 32 35 2 111.00 530.00
33 32 34 2 106.00 1733.55
33 32 35 2 109.00 1680.51
34 32 35 2 109.00 1680.51
32 35 36 2 109.00 1680.51
32 35 37 2 109.00 1680.51
32 35 38 2 111.00 530.00
36 35 37 2 106.00 1733.55
36 35 38 2 109.00 1680.51
37 35 38 2 109.00 1680.51
35 38 39 2 109.50 285.00
35 38 40 2 109.50 285.00
35 38 41 2 111.00 530.00
39 38 40 2 106.00 1733.55
39 38 41 2 109.00 1680.51
40 38 41 2 109.00 1680.51
38 41 42 2 109.00 1680.51
38 41 43 2 109.00 1680.51
38 41 44 2 111.00 530.00
42 41 43 2 106.00 1733.55
42 41 44 2 109.50 285.00
43 41 44 2 109.50 285.00
41 44 45 2 111.40 532.00
41 44 46 2 111.40 532.00
41 44 47 2 111.40 532.00
45 44 46 2 107.57 484.00
45 44 47 2 107.57 484.00
46 44 47 2 107.57 484.00

```

```

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc
dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 44 1 0.00 5.92 3
38 41 44 45 1 0.00 5.92 3

```

angles

clusions

```

; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

```

## ■ Hexadecano (C<sub>16</sub>H<sub>34</sub>)

moleculetype

```

; Name nrexcl
c16 3

```

atoms

```

; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_140 1 c16 H3 1 0.069 1.0080
2 opls_157 1 c16 C1 1 -0.299 12.0110
3 opls_140 1 c16 H1 1 0.069 1.0080
4 opls_140 1 c16 H2 1 0.069 1.0080
5 opls_158 1 c16 C2 1 0.159 12.0110
6 opls_140 1 c16 H4 1 -0.023 1.0080
7 opls_140 1 c16 H5 1 -0.023 1.0080
; 0.021
8 opls_158 1 c16 C3 2 0.004 12.0110
9 opls_140 1 c16 H6 2 0.003 1.0080
10 opls_140 1 c16 H7 2 0.003 1.0080
11 opls_158 1 c16 C4 2 -0.097
12.0110
12 opls_140 1 c16 H8 2 0.014 1.0080
13 opls_140 1 c16 H9 2 0.014 1.0080
14 opls_158 1 c16 C5 2 0.079 12.0110
15 opls_140 1 c16 H10 2 -0.018
1.0080
16 opls_140 1 c16 H11 2 -0.018
1.0080 ; -0.016
17 opls_158 1 c16 C6 3 0.030 12.0110
18 opls_140 1 c16 H12 3 -0.008
1.0080
19 opls_140 1 c16 H13 3 -0.008
1.0080
20 opls_158 1 c16 C7 3 -0.049
12.0110
21 opls_140 1 c16 H14 3 0.005 1.0080
22 opls_140 1 c16 H15 3 0.005 1.0080
23 opls_158 1 c16 C8 3 0.040 12.0110
24 opls_140 1 c16 H16 3 -0.010
1.0080
25 opls_140 1 c16 H17 3 -0.010
1.0080 ; -0.005
26 opls_158 1 c16 C9 4 0.040 12.0110
27 opls_140 1 c16 H18 4 -0.010
1.0080
28 opls_140 1 c16 H19 4 -0.010
1.0080
29 opls_158 1 c16 C10 4 -0.049
12.0110
30 opls_140 1 c16 H20 4 0.005 1.0080
31 opls_140 1 c16 H21 4 0.005 1.0080
32 opls_158 1 c16 C11 4 0.030
12.0110
33 opls_140 1 c16 H22 4 -0.008
1.0080
34 opls_140 1 c16 H23 4 -0.008
1.0080 ; -0.005
35 opls_158 1 c16 C12 5 0.079
12.0110
36 opls_140 1 c16 H24 5 -0.018
1.0080
37 opls_140 1 c16 H25 5 -0.018
1.0080
38 opls_158 1 c16 C13 5 -0.097
12.0110
39 opls_140 1 c16 H26 5 0.014 1.0080
40 opls_140 1 c16 H27 5 0.014 1.0080
41 opls_158 1 c16 C14 5 0.004
12.0110
42 opls_140 1 c16 H28 5 0.003 1.0080
43 opls_140 1 c16 H29 5 0.003 1.0080
; -0.016
44 opls_158 1 c16 C15 6 0.159
12.0110
45 opls_140 1 c16 H30 6 -0.023

```

```

1.0080
46 oplsl140 1 c16 H31 6 -0.023
1.0080
47 oplsl157 1 c16 C16 6 -0.299
12.0110
48 oplsl140 1 c16 H32 6 0.069 1.0080
49 oplsl140 1 c16 H33 6 0.069 1.0080
50 oplsl140 1 c16 H34 6 0.069 1.0080
; 0.021
; total charge of the molecule:
0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1530 7.1500e+06
5 6 2 0.1090 1.2300e+07
5 7 2 0.1090 1.2300e+07
5 8 2 0.1530 7.1500e+06
8 9 2 0.1100 1.2100e+07
8 10 2 0.1100 1.2100e+07
8 11 2 0.1530 7.1500e+06
11 12 2 0.1100 1.2100e+07
11 13 2 0.1100 1.2100e+07
11 14 2 0.1530 7.1500e+06
14 15 2 0.1100 1.2100e+07
14 16 2 0.1100 1.2100e+07
14 17 2 0.1530 7.1500e+06
17 18 2 0.1100 1.2100e+07
17 19 2 0.1100 1.2100e+07
17 20 2 0.1530 7.1500e+06
20 21 2 0.1100 1.2100e+07
20 22 2 0.1100 1.2100e+07
20 23 2 0.1530 7.1500e+06
23 24 2 0.1100 1.2100e+07
23 25 2 0.1100 1.2100e+07
23 26 2 0.1530 7.1500e+06
26 27 2 0.1100 1.2100e+07
26 28 2 0.1100 1.2100e+07
26 29 2 0.1530 7.1500e+06
29 30 2 0.1100 1.2100e+07
29 31 2 0.1100 1.2100e+07
29 32 2 0.1530 7.1500e+06
32 33 2 0.1100 1.2100e+07
32 34 2 0.1100 1.2100e+07
32 35 2 0.1530 7.1500e+06
35 36 2 0.1100 1.2100e+07
35 37 2 0.1100 1.2100e+07
35 38 2 0.1530 7.1500e+06
38 39 2 0.1100 1.2100e+07
38 40 2 0.1100 1.2100e+07
38 41 2 0.1530 7.1500e+06
41 42 2 0.1100 1.2100e+07
41 43 2 0.1100 1.2100e+07
41 44 2 0.1530 7.1500e+06
44 45 2 0.1090 1.2300e+07
44 46 2 0.1090 1.2300e+07
44 47 2 0.1530 7.1500e+06
47 48 2 0.1090 1.2300e+07
47 49 2 0.1090 1.2300e+07
47 50 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1

8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1
17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
20 27 1
20 28 1
20 29 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1
23 30 1
23 31 1
23 32 1
24 27 1
24 28 1
24 29 1
25 27 1
25 28 1
25 29 1
26 33 1
26 34 1
26 35 1
27 30 1
27 31 1
27 32 1
28 30 1
28 31 1
28 32 1
29 36 1
29 37 1
29 38 1
30 33 1
30 34 1
30 35 1
31 33 1
31 34 1
31 35 1
32 39 1
32 40 1
32 41 1
33 36 1
33 37 1
33 38 1
34 36 1
34 37 1
34 38 1
35 42 1
35 43 1
35 44 1
36 39 1
36 40 1
36 41 1
37 39 1
37 40 1

37 41 1
38 45 1
38 46 1
38 47 1
39 42 1
39 43 1
39 44 1
40 42 1
40 43 1
40 44 1
41 48 1
41 49 1
41 50 1
46 48 1
46 49 1
46 50 1

angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.40 532.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.40 532.00
4 2 5 2 111.40 532.00
2 5 6 2 109.50 285.00
2 5 7 2 109.50 285.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 109.00 1680.51
7 5 8 2 109.00 1680.51
5 8 9 2 109.00 1680.51
5 8 10 2 109.00 1680.51
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 109.50 285.00
10 8 11 2 109.50 285.00
8 11 12 2 109.00 1680.51
8 11 13 2 109.00 1680.51
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 109.00 1680.51
13 11 14 2 109.00 1680.51
11 14 15 2 109.00 1680.51
11 14 16 2 109.00 1680.51
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 109.00 1680.51
16 14 17 2 109.00 1680.51
14 17 18 2 109.00 1680.51
14 17 19 2 109.00 1680.51
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 106.00 1733.55
18 17 20 2 109.00 1680.51
19 17 20 2 109.00 1680.51
17 20 21 2 109.00 1680.51
17 20 22 2 109.00 1680.51
17 20 23 2 111.00 530.00
21 20 22 2 106.00 1733.55
21 20 23 2 109.00 1680.51
22 20 23 2 109.00 1680.51
20 23 24 2 109.00 1680.51
20 23 25 2 109.00 1680.51
20 23 26 2 111.00 530.00
24 23 25 2 106.00 1733.55
24 23 26 2 109.00 1680.51
25 23 26 2 109.00 1680.51
23 26 27 2 109.00 1680.51
23 26 28 2 109.00 1680.51
23 26 29 2 111.00 530.00
27 26 28 2 106.00 1733.55
27 26 29 2 109.00 1680.51
28 26 29 2 109.00 1680.51
26 29 30 2 109.00 1680.51
26 29 31 2 109.00 1680.51
26 29 32 2 111.00 530.00
30 29 31 2 106.00 1733.55
30 29 32 2 109.00 1680.51
31 29 32 2 109.00 1680.51

```

```

29 32 33 2 109.00 1680.51
29 32 34 2 109.00 1680.51
29 32 35 2 111.00 530.00
33 32 34 2 106.00 1733.55
33 32 35 2 109.00 1680.51
34 32 35 2 109.00 1680.51
32 35 36 2 109.00 1680.51
32 35 37 2 109.00 1680.51
32 35 38 2 111.00 530.00
36 35 37 2 106.00 1733.55
36 35 38 2 109.00 1680.51
37 35 38 2 109.00 1680.51
35 38 39 2 109.00 1680.51
35 38 40 2 109.00 1680.51
35 38 41 2 111.00 530.00
39 38 40 2 106.00 1733.55
39 38 41 2 109.00 1680.51
40 38 41 2 109.00 1680.51
38 41 42 2 109.50 285.00
38 41 43 2 109.50 285.00
38 41 44 2 111.00 530.00
42 41 43 2 106.00 1733.55
42 41 44 2 109.00 1680.51
43 41 44 2 109.00 1680.51
41 44 45 2 109.00 1680.51
41 44 46 2 109.00 1680.51
41 44 47 2 111.00 530.00
45 44 46 2 106.00 1733.55
45 44 47 2 109.50 285.00
46 44 47 2 109.50 285.00
44 47 48 2 111.40 532.00
44 47 49 2 111.40 532.00
44 47 50 2 111.40 532.00
48 47 49 2 107.57 484.00
48 47 50 2 107.57 484.00
49 47 50 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 44 1 0.00 5.92 3
38 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 48 1 0.00 5.92 3

clussions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

■ Heptadecano (C17H36) bonds

moleculetype
; Name nrexcl
c17 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total.charge
1 opls.140 1 c17 H3 1 0.037 1.0080
2 opls.157 1 c17 C1 1 -0.109 12.0110
3 opls.140 1 c17 H1 1 0.037 1.0080
4 opls.140 1 c17 H2 1 0.037 1.0080
5 opls.158 1 c17 C2 1 -0.098 12.0110
6 opls.140 1 c17 H4 1 0.048 1.0080
7 opls.140 1 c17 H5 1 0.048 1.0080

8 opls.158 1 c17 C3 1 -0.103 12.0110
9 opls.140 1 c17 H6 1 0.051 1.0080
10 opls.140 1 c17 H7 1 0.051 1.0080
; -0.001
11 opls.158 1 c17 C4 2 -0.102
12.0110
12 opls.140 1 c17 H8 2 0.051 1.0080
13 opls.140 1 c17 H9 2 0.051 1.0080
14 opls.158 1 c17 C5 2 -0.102
12.0110
15 opls.140 1 c17 H10 2 0.051 1.0080
16 opls.140 1 c17 H11 2 0.051 1.0080
17 opls.158 1 c17 C6 2 -0.102
12.0110
18 opls.140 1 c17 H12 2 0.051 1.0080
19 opls.140 1 c17 H13 2 0.051 1.0080
; 0.000
20 opls.158 1 c17 C7 3 -0.102
12.0110
21 opls.140 1 c17 H14 3 0.051 1.0080
22 opls.140 1 c17 H15 3 0.051 1.0080
23 opls.158 1 c17 C8 3 -0.102
12.0110
24 opls.140 1 c17 H16 3 0.051 1.0080
25 opls.140 1 c17 H17 3 0.051 1.0080
26 opls.158 1 c17 C9 3 -0.100
12.0110
27 opls.140 1 c17 H18 3 0.051 1.0080
28 opls.140 1 c17 H19 3 0.051 1.0080
; 0.002
29 opls.158 1 c17 C10 4 -0.102
12.0110
30 opls.140 1 c17 H20 4 0.051 1.0080
31 opls.140 1 c17 H21 4 0.051 1.0080
32 opls.158 1 c17 C11 4 -0.102
12.0110
33 opls.140 1 c17 H22 4 0.051 1.0080
34 opls.140 1 c17 H23 4 0.051 1.0080
; 0.000
35 opls.158 1 c17 C12 5 -0.102
12.0110
36 opls.140 1 c17 H24 5 0.051 1.0080
37 opls.140 1 c17 H25 5 0.051 1.0080
38 opls.158 1 c17 C13 5 -0.102
12.0110
39 opls.140 1 c17 H26 5 0.051 1.0080
40 opls.140 1 c17 H27 5 0.051 1.0080
41 opls.158 1 c17 C14 5 -0.102
12.0110
42 opls.140 1 c17 H28 5 0.051 1.0080
43 opls.140 1 c17 H29 5 0.051 1.0080
; 0.000
44 opls.158 1 c17 C15 6 -0.103
12.0110
45 opls.140 1 c17 H30 6 0.051 1.0080
46 opls.140 1 c17 H31 6 0.051 1.0080
47 opls.158 1 c17 C16 6 -0.098
12.0110
48 opls.140 1 c17 H32 6 0.048 1.0080
49 opls.140 1 c17 H33 6 0.048 1.0080
50 opls.157 1 c17 C17 6 -0.109
12.0110
51 opls.140 1 c17 H34 6 0.037 1.0080
52 opls.140 1 c17 H35 6 0.037 1.0080
53 opls.140 1 c17 H36 6 0.037 1.0080
; -0.001
; total charge of the molecule:
-0.000

; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1520 5.4300e+06
5 6 2 0.1110 4.8697e+06
5 7 2 0.1110 4.8697e+06
5 8 2 0.1520 5.4300e+06
8 9 2 0.1110 4.8697e+06
8 10 2 0.1110 4.8697e+06
8 11 2 0.1520 5.4300e+06
11 12 2 0.1110 4.8697e+06
11 13 2 0.1110 4.8697e+06
11 14 2 0.1520 5.4300e+06
14 15 2 0.1110 4.8697e+06
14 16 2 0.1110 4.8697e+06
14 17 2 0.1520 5.4300e+06
17 18 2 0.1110 4.8697e+06
17 19 2 0.1110 4.8697e+06

17 20 2 0.1520 5.4300e+06
20 21 2 0.1110 4.8697e+06
20 22 2 0.1110 4.8697e+06
20 23 2 0.1520 5.4300e+06
23 24 2 0.1110 4.8697e+06
23 25 2 0.1110 4.8697e+06
23 26 2 0.1520 5.4300e+06
26 27 2 0.1110 4.8697e+06
26 28 2 0.1110 4.8697e+06
26 29 2 0.1520 5.4300e+06
29 30 2 0.1110 4.8697e+06
29 31 2 0.1110 4.8697e+06
29 32 2 0.1520 5.4300e+06
32 33 2 0.1110 4.8697e+06
32 34 2 0.1110 4.8697e+06
32 35 2 0.1520 5.4300e+06
35 36 2 0.1110 4.8697e+06
35 37 2 0.1110 4.8697e+06
35 38 2 0.1520 5.4300e+06
38 39 2 0.1110 4.8697e+06
38 40 2 0.1110 4.8697e+06
38 41 2 0.1520 5.4300e+06
41 42 2 0.1110 4.8697e+06
41 43 2 0.1110 4.8697e+06
41 44 2 0.1520 5.4300e+06
44 45 2 0.1110 4.8697e+06
44 46 2 0.1110 4.8697e+06
44 47 2 0.1520 5.4300e+06
47 48 2 0.1110 4.8697e+06
47 49 2 0.1110 4.8697e+06
47 50 2 0.1520 5.4300e+06
50 51 2 0.1090 1.2300e+07
50 52 2 0.1090 1.2300e+07
50 53 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1

```

```

17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
20 27 1
20 28 1
20 29 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1
23 30 1
23 31 1
23 32 1
24 27 1
24 28 1
24 29 1
25 27 1
25 28 1
25 29 1
26 33 1
26 34 1
26 35 1
27 30 1
27 31 1
27 32 1
28 30 1
28 31 1
28 32 1
29 36 1
29 37 1
29 38 1
30 33 1
30 34 1
30 35 1
31 33 1
31 34 1
31 35 1
32 39 1
32 40 1
32 41 1
33 36 1
33 37 1
33 38 1
34 36 1
34 37 1
34 38 1
35 42 1
35 43 1
35 44 1
36 39 1
36 40 1
36 41 1
37 39 1
37 40 1
37 41 1
38 45 1
38 46 1
38 47 1
39 42 1
39 43 1
39 44 1
40 42 1
40 43 1
40 44 1
41 48 1
41 49 1
41 50 1
42 45 1
42 46 1
42 47 1
43 45 1
43 46 1
43 47 1
44 51 1
44 52 1
44 53 1
45 48 1
45 49 1
45 50 1
46 48 1
46 49 1
46 50 1
48 51 1
48 52 1
49 53 1
49 53 1

angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.30 632.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.30 632.00
4 2 5 2 111.30 632.00
2 5 6 2 110.00 4763.46
2 5 7 2 110.00 4763.46
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 110.00 4763.46
7 5 8 2 110.00 4763.46
5 8 9 2 110.00 4763.46
5 8 10 2 110.00 4763.46
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 110.00 4763.46
10 8 11 2 110.00 4763.46
8 11 12 2 110.00 4763.46
8 11 13 2 110.00 4763.46
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 110.00 4763.46
13 11 14 2 110.00 4763.46
11 14 15 2 110.00 4763.46
11 14 16 2 110.00 4763.46
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 110.00 4763.46
16 14 17 2 110.00 4763.46
14 17 18 2 110.00 4763.46
14 17 19 2 110.00 4763.46
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 106.00 1733.55
18 17 20 2 110.00 4763.46
19 17 20 2 110.00 4763.46
17 20 21 2 110.00 4763.46
17 20 22 2 110.00 4763.46
17 20 23 2 111.00 530.00
21 20 22 2 106.00 1733.55
21 20 23 2 110.00 4763.46
22 20 23 2 110.00 4763.46
20 23 24 2 110.00 4763.46
20 23 25 2 110.00 4763.46
20 23 26 2 111.00 530.00
24 23 25 2 106.00 1733.55
24 23 26 2 110.00 4763.46
25 23 26 2 110.00 4763.46
23 26 27 2 110.00 4763.46
23 26 28 2 110.00 4763.46
23 26 29 2 111.00 530.00
27 26 28 2 106.00 1733.55
27 26 29 2 110.00 4763.46
28 26 29 2 110.00 4763.46
26 29 30 2 110.00 4763.46
26 29 31 2 110.00 4763.46
26 29 32 2 111.00 530.00
30 29 31 2 106.00 1733.55
30 29 32 2 110.00 4763.46
31 29 32 2 110.00 4763.46
29 32 33 2 110.00 4763.46
29 32 34 2 110.00 4763.46
29 32 35 2 111.00 530.00
33 32 34 2 106.00 1733.55
33 32 35 2 110.00 4763.46
34 32 35 2 110.00 4763.46
32 35 36 2 110.00 4763.46
32 35 37 2 110.00 4763.46
32 35 38 2 111.00 530.00
36 35 37 2 106.00 1733.55
36 35 38 2 110.00 4763.46
37 35 38 2 110.00 4763.46
35 38 39 2 110.00 4763.46
35 38 40 2 110.00 4763.46
35 38 41 2 111.00 530.00
39 38 40 2 106.00 1733.55
39 38 41 2 110.00 4763.46
40 38 41 2 110.00 4763.46
38 41 42 2 110.00 4763.46
38 41 43 2 110.00 4763.46
38 41 44 2 111.00 530.00
42 41 43 2 106.00 1733.55
42 41 44 2 110.00 4763.46
43 41 44 2 110.00 4763.46
41 44 45 2 110.00 4763.46
41 44 46 2 110.00 4763.46
41 44 47 2 111.00 530.00
45 44 46 2 106.00 1733.55
45 44 47 2 110.00 4763.46
46 44 47 2 110.00 4763.46
44 47 48 2 110.00 4763.46
44 47 49 2 110.00 4763.46
44 47 50 2 111.00 530.00
48 47 49 2 106.00 1733.55
48 47 50 2 110.00 4763.46
49 47 50 2 110.00 4763.46
47 50 51 2 111.30 632.00
47 50 52 2 111.30 632.00
47 50 53 2 111.30 632.00
51 50 52 2 107.57 484.00
51 50 53 2 107.57 484.00
52 50 53 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 44 1 0.00 5.92 3
38 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 50 1 0.00 5.92 3
44 47 50 51 1 0.00 5.92 3

exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4 exclusion

moleculetype
; Name nrexcl
c18 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_140 1 c18 H35 1 0.037 1.0080
2 opls_157 1 c18 CH3 1 -0.108
12.0110
3 opls_140 1 c18 H33 1 0.037 1.0080
4 opls_140 1 c18 H34 1 0.037 1.0080
5 opls_158 1 c18 C2 1 -0.098 12.0110
6 opls_140 1 c18 H1 1 0.048 1.0080
7 opls_140 1 c18 H2 1 0.048 1.0080
8 opls_158 1 c18 C21 1 -0.103
12.0110
9 opls_140 1 c18 H17 1 0.051 1.0080
10 opls_140 1 c18 H18 1 0.051 1.0080
; -0.000
11 opls_158 1 c18 C22 2 -0.102
12.0110
12 opls_140 1 c18 H3 2 0.051 1.0080
13 opls_140 1 c18 H4 2 0.051 1.0080
14 opls_158 1 c18 C23 2 -0.102
12.0110
15 opls_140 1 c18 H19 2 0.051 1.0080
16 opls_140 1 c18 H20 2 0.051 1.0080

```

## ■ Octadecano ( $C_{18}H_{38}$ )

```

17 opls_158 1 c18 C24 2 -0.102
12.0110
18 opls_140 1 c18 H5 2 0.051 1.0080
19 opls_140 1 c18 H6 2 0.051 1.0080
; 0.000
20 opls_158 1 c18 C25 3 -0.102
12.0110
21 opls_140 1 c18 H21 3 0.051 1.0080
22 opls_140 1 c18 H22 3 0.051 1.0080
23 opls_158 1 c18 C26 3 -0.102
12.0110
24 opls_140 1 c18 H7 3 0.051 1.0080
25 opls_140 1 c18 H8 3 0.051 1.0080
26 opls_158 1 c18 C27 3 -0.102
12.0110
27 opls_140 1 c18 H23 3 0.051 1.0080
28 opls_140 1 c18 H24 3 0.051 1.0080
; 0.000
29 opls_158 1 c18 C28 4 -0.102
12.0110
30 opls_140 1 c18 H9 4 0.051 1.0080
31 opls_140 1 c18 H10 4 0.051 1.0080
32 opls_158 1 c18 C29 4 -0.102
12.0110
33 opls_140 1 c18 H25 4 0.051 1.0080
34 opls_140 1 c18 H26 4 0.051 1.0080
35 opls_158 1 c18 C210 4 -0.102
12.0110
36 opls_140 1 c18 H11 4 0.051 1.0080
37 opls_140 1 c18 H12 4 0.051 1.0080
; 0.000
38 opls_158 1 c18 C211 5 -0.102
12.0110
39 opls_140 1 c18 H27 5 0.051 1.0080
40 opls_140 1 c18 H28 5 0.051 1.0080
41 opls_158 1 c18 C212 5 -0.102
12.0110
42 opls_140 1 c18 H13 5 0.051 1.0080
43 opls_140 1 c18 H14 5 0.051 1.0080
44 opls_158 1 c18 C213 5 -0.102
12.0110
45 opls_140 1 c18 H29 5 0.051 1.0080
46 opls_140 1 c18 H30 5 0.051 1.0080
; 0.000
47 opls_158 1 c18 C214 6 -0.103
12.0110
48 opls_140 1 c18 H15 6 0.051 1.0080
49 opls_140 1 c18 H16 6 0.051 1.0080
50 opls_158 1 c18 C215 6 -0.098
12.0110
51 opls_140 1 c18 H31 6 0.048 1.0080
52 opls_140 1 c18 H32 6 0.048 1.0080
53 opls_157 1 c18 CH31 6 -0.108
12.0110
54 opls_140 1 c18 H36 6 0.037 1.0080
55 opls_140 1 c18 H37 6 0.037 1.0080
56 opls_140 1 c18 H38 6 0.037 1.0080
; -0.000
; total charge of the molecule:
-0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1520 5.4300e+06
5 6 2 0.1110 4.8697e+06
5 7 2 0.1110 4.8697e+06
5 8 2 0.1520 5.4300e+06
8 9 2 0.1110 4.8697e+06
8 10 2 0.1110 4.8697e+06
8 11 2 0.1520 5.4300e+06
11 12 2 0.1110 4.8697e+06
11 13 2 0.1110 4.8697e+06
11 14 2 0.1520 5.4300e+06
14 15 2 0.1110 4.8697e+06
14 16 2 0.1110 4.8697e+06
14 17 2 0.1520 5.4300e+06
17 18 2 0.1110 4.8697e+06
17 19 2 0.1110 4.8697e+06
17 20 2 0.1520 5.4300e+06
20 21 2 0.1110 4.8697e+06
20 22 2 0.1110 4.8697e+06
20 23 2 0.1520 5.4300e+06
23 24 2 0.1110 4.8697e+06
23 25 2 0.1110 4.8697e+06
23 26 2 0.1520 5.4300e+06
26 27 2 0.1110 4.8697e+06

26 28 2 0.1110 4.8697e+06
26 29 2 0.1520 5.4300e+06
29 30 2 0.1110 4.8697e+06
29 31 2 0.1110 4.8697e+06
29 32 2 0.1520 5.4300e+06
32 33 2 0.1110 4.8697e+06
32 34 2 0.1110 4.8697e+06
32 35 2 0.1520 5.4300e+06
35 36 2 0.1110 4.8697e+06
35 37 2 0.1110 4.8697e+06
35 38 2 0.1520 5.4300e+06
38 39 2 0.1110 4.8697e+06
38 40 2 0.1110 4.8697e+06
38 41 2 0.1520 5.4300e+06
41 42 2 0.1110 4.8697e+06
41 43 2 0.1110 4.8697e+06
41 44 2 0.1520 5.4300e+06
44 45 2 0.1110 4.8697e+06
44 46 2 0.1110 4.8697e+06
44 47 2 0.1520 5.4300e+06
47 48 2 0.1110 4.8697e+06
47 49 2 0.1110 4.8697e+06
47 50 2 0.1520 5.4300e+06
50 51 2 0.1110 4.8697e+06
50 52 2 0.1110 4.8697e+06
50 53 2 0.1520 5.4300e+06
53 54 2 0.1090 1.2300e+07
53 55 2 0.1090 1.2300e+07
53 56 2 0.1090 1.2300e+07

19 22 1
19 23 1
20 27 1
20 28 1
20 29 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1
23 30 1
23 31 1
23 32 1
24 27 1
24 28 1
24 29 1
25 27 1
25 28 1
25 29 1
26 33 1
26 34 1
26 35 1
27 30 1
27 31 1
27 32 1
28 30 1
28 31 1
28 32 1
29 36 1
29 37 1
29 38 1
30 33 1
30 34 1
30 35 1
31 33 1
31 34 1
31 35 1
32 39 1
32 40 1
32 41 1
33 36 1
33 37 1
33 38 1
34 36 1
34 37 1
34 38 1
35 42 1
35 43 1
35 44 1
36 39 1
36 40 1
36 41 1
37 39 1
37 40 1
37 41 1
38 45 1
38 46 1
38 47 1
39 42 1
39 43 1
39 44 1
40 42 1
40 43 1
40 44 1
41 48 1
41 49 1
41 50 1
42 45 1
42 46 1
42 47 1
43 45 1
43 46 1
43 47 1
44 51 1
44 52 1
44 53 1
45 48 1
45 49 1
45 50 1
46 48 1
46 49 1
46 50 1
47 54 1
47 55 1
47 56 1
48 51 1
48 52 1
48 53 1

```

```

49 51 1
49 52 1
49 53 1
51 54 1
51 55 1
51 56 1
52 54 1
52 55 1
52 56 1

angles

; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.30 632.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.30 632.00
4 2 5 2 111.30 632.00
2 5 6 2 110.00 4763.46
2 5 7 2 110.00 4763.46
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 110.00 4763.46
7 5 8 2 110.00 4763.46
5 8 9 2 110.00 4763.46
5 8 10 2 110.00 4763.46
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 110.00 4763.46
10 8 11 2 110.00 4763.46
8 11 12 2 110.00 4763.46
8 11 13 2 110.00 4763.46
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 110.00 4763.46
13 11 14 2 110.00 4763.46
11 14 15 2 110.00 4763.46
11 14 16 2 110.00 4763.46
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 110.00 4763.46
16 14 17 2 110.00 4763.46
14 17 18 2 110.00 4763.46
14 17 19 2 110.00 4763.46
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 106.00 1733.55
18 17 20 2 110.00 4763.46
19 17 20 2 110.00 4763.46
17 20 21 2 110.00 4763.46
17 20 22 2 110.00 4763.46
17 20 23 2 111.00 530.00
21 20 22 2 106.00 1733.55
21 20 23 2 110.00 4763.46
22 20 23 2 110.00 4763.46
20 23 24 2 110.00 4763.46
20 23 25 2 110.00 4763.46
20 23 26 2 111.00 530.00
24 23 25 2 106.00 1733.55
24 23 26 2 110.00 4763.46
25 23 26 2 110.00 4763.46
23 26 27 2 110.00 4763.46
23 26 28 2 110.00 4763.46
23 26 29 2 111.00 530.00
27 26 28 2 106.00 1733.55
27 26 29 2 110.00 4763.46
28 26 29 2 110.00 4763.46
26 29 30 2 110.00 4763.46
26 29 31 2 110.00 4763.46
26 29 32 2 111.00 530.00
30 29 31 2 106.00 1733.55
30 29 32 2 110.00 4763.46
29 32 33 2 110.00 4763.46
29 32 34 2 110.00 4763.46
29 32 35 2 111.00 530.00
33 32 34 2 106.00 1733.55
33 32 35 2 110.00 4763.46
34 32 35 2 110.00 4763.46
32 35 36 2 110.00 4763.46
32 35 37 2 110.00 4763.46
32 35 38 2 111.00 530.00
36 35 37 2 106.00 1733.55
36 35 38 2 110.00 4763.46
37 35 38 2 110.00 4763.46
35 38 39 2 110.00 4763.46
35 38 40 2 110.00 4763.46
35 38 41 2 111.00 530.00
39 38 40 2 106.00 1733.55

39 38 41 2 110.00 4763.46
40 38 41 2 110.00 4763.46
38 41 42 2 110.00 4763.46
38 41 43 2 110.00 4763.46
38 41 44 2 111.00 530.00
42 41 43 2 106.00 1733.55
42 41 44 2 110.00 4763.46
43 41 44 2 110.00 4763.46
41 44 45 2 110.00 4763.46
41 44 46 2 110.00 4763.46
41 44 47 2 111.00 530.00
45 44 46 2 106.00 1733.55
45 44 47 2 110.00 4763.46
46 44 47 2 110.00 4763.46
44 47 48 2 110.00 4763.46
44 47 49 2 110.00 4763.46
44 47 50 2 111.00 530.00
48 47 49 2 106.00 1733.55
48 47 50 2 110.00 4763.46
49 47 50 2 110.00 4763.46
47 50 51 2 110.00 4763.46
47 50 52 2 110.00 4763.46
47 50 53 2 111.00 530.00
51 50 52 2 106.00 1733.55
51 50 53 2 110.00 4763.46
52 50 53 2 110.00 4763.46
50 53 54 2 111.30 632.00
50 53 55 2 111.30 632.00
50 53 56 2 111.30 632.00
54 53 55 2 107.57 484.00
54 53 56 2 107.57 484.00
55 53 56 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 44 1 0.00 5.92 3
38 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 50 1 0.00 5.92 3
44 47 50 53 1 0.00 5.92 3
47 50 53 54 1 0.00 5.92 3

clussions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c19 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 oplsl140 1 c19 H34 1 0.037 1.0080
2 oplsl157 1 c19 C17 1 -0.104
12.0110
3 oplsl140 1 c19 H32 1 0.037 1.0080
4 oplsl140 1 c19 H33 1 0.037 1.0080
5 oplsl158 1 c19 C4 1 -0.117 12.0110
6 oplsl140 1 c19 H6 1 0.057 1.0080
7 oplsl140 1 c19 H7 1 0.057 1.0080
8 oplsl158 1 c19 C3 1 -0.114 12.0110

9 oplsl140 1 c19 H4 1 0.058 1.0080
10 oplsl140 1 c19 H5 1 0.052 1.0080
; -0.000
11 oplsl158 1 c19 C2 2 -0.082
12.0110
12 oplsl140 1 c19 H3 2 0.076 1.0080
13 oplsl158 1 c19 C1 2 -0.111
12.0110
14 oplsl140 1 c19 H1 2 0.060 1.0080
15 oplsl140 1 c19 H2 2 0.054 1.0080
16 oplsl158 1 c19 C5 2 -0.111
12.0110
17 oplsl140 1 c19 H8 2 0.060 1.0080
18 oplsl140 1 c19 H9 2 0.054 1.0080
; -0.000
19 oplsl158 1 c19 C7 3 -0.111
12.0110
20 oplsl140 1 c19 H12 3 0.058 1.0080
21 oplsl140 1 c19 H13 3 0.051 1.0080
22 oplsl158 1 c19 C8 3 -0.100
12.0110
23 oplsl140 1 c19 H14 3 0.051 1.0080
24 oplsl140 1 c19 H15 3 0.051 1.0080
; -0.000
25 oplsl158 1 c19 C9 4 -0.102
12.0110
26 oplsl140 1 c19 H16 4 0.051 1.0080
27 oplsl140 1 c19 H17 4 0.051 1.0080
28 oplsl158 1 c19 C10 4 -0.102
12.0110
29 oplsl140 1 c19 H18 4 0.051 1.0080
30 oplsl140 1 c19 H19 4 0.051 1.0080
; 0.000
31 oplsl158 1 c19 C11 5 -0.103
12.0110
32 oplsl140 1 c19 H20 5 0.052 1.0080
33 oplsl140 1 c19 H21 5 0.051 1.0080
34 oplsl158 1 c19 C12 5 -0.098
12.0110
35 oplsl140 1 c19 H22 5 0.048 1.0080
36 oplsl140 1 c19 H23 5 0.048 1.0080
37 oplsl157 1 c19 C18 5 -0.109
12.0110
38 oplsl140 1 c19 H35 5 0.037 1.0080
39 oplsl140 1 c19 H36 5 0.037 1.0080
40 oplsl140 1 c19 H37 5 0.037 1.0080
; -0.000
41 oplsl158 1 c19 C6 6 -0.110
12.0110
42 oplsl140 1 c19 H10 6 0.057 1.0080
43 oplsl140 1 c19 H11 6 0.051 1.0080
44 oplsl158 1 c19 C13 6 -0.100
12.0110
45 oplsl140 1 c19 H24 6 0.051 1.0080
46 oplsl140 1 c19 H25 6 0.037 1.0080
47 oplsl158 1 c19 C14 6 -0.102
12.0110
48 oplsl140 1 c19 H26 6 0.051 1.0080
49 oplsl140 1 c19 H27 6 0.051 1.0080
; -0.000
50 oplsl158 1 c19 C15 7 -0.103
12.0110
51 oplsl140 1 c19 H28 7 0.052 1.0080
52 oplsl140 1 c19 H29 7 0.051 1.0080
53 oplsl158 1 c19 C16 7 -0.098
12.0110
54 oplsl140 1 c19 H30 7 0.048 1.0080
55 oplsl140 1 c19 H31 7 0.048 1.0080
56 oplsl157 1 c19 C19 7 -0.109
12.0110
57 oplsl140 1 c19 H38 7 0.037 1.0080
58 oplsl140 1 c19 H39 7 0.037 1.0080
59 oplsl140 1 c19 H40 7 0.037 1.0080
; -0.000
; total charge of the molecule:
-0.000

; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1510 3.7279e+06
5 6 2 0.1110 4.8697e+06
5 7 2 0.1110 4.8697e+06
5 8 2 0.1520 5.4300e+06
8 9 2 0.1110 4.8697e+06
8 10 2 0.1110 4.8697e+06
8 11 2 0.1530 7.1500e+06

```

■ Nonadecano (C<sub>19</sub>H<sub>40</sub>)

```

11 12 2 0.1120 3.7000e+07
11 13 2 0.1530 7.1500e+06
11 16 2 0.1530 7.1500e+06
13 14 2 0.1110 4.8697e+06
13 15 2 0.1110 4.8697e+06
13 19 2 0.1520 5.4300e+06
16 17 2 0.1110 4.8697e+06
16 18 2 0.1110 4.8697e+06
16 41 2 0.1520 5.4300e+06
19 20 2 0.1110 4.8697e+06
19 21 2 0.1110 4.8697e+06
19 22 2 0.1520 5.4300e+06
22 23 2 0.1110 4.8697e+06
22 24 2 0.1110 4.8697e+06
22 25 2 0.1520 5.4300e+06
25 26 2 0.1110 4.8697e+06
25 27 2 0.1110 4.8697e+06
25 28 2 0.1520 5.4300e+06
28 29 2 0.1110 4.8697e+06
28 30 2 0.1110 4.8697e+06
28 31 2 0.1520 5.4300e+06
31 32 2 0.1110 4.8697e+06
31 33 2 0.1110 4.8697e+06
31 34 2 0.1520 5.4300e+06
34 35 2 0.1110 4.8697e+06
34 36 2 0.1110 4.8697e+06
34 37 2 0.1520 5.4300e+06
37 38 2 0.1090 1.2300e+07
37 39 2 0.1090 1.2300e+07
37 40 2 0.1090 1.2300e+07
41 42 2 0.1110 4.8697e+06
41 43 2 0.1110 4.8697e+06
41 44 2 0.1520 5.4300e+06
44 45 2 0.1110 4.8697e+06
44 46 2 0.1110 4.8697e+06
44 47 2 0.1520 5.4300e+06
47 48 2 0.1110 4.8697e+06
47 49 2 0.1110 4.8697e+06
47 50 2 0.1520 5.4300e+06
50 51 2 0.1110 4.8697e+06
50 52 2 0.1110 4.8697e+06
50 53 2 0.1520 5.4300e+06
53 54 2 0.1110 4.8697e+06
53 55 2 0.1110 4.8697e+06
53 56 2 0.1520 5.4300e+06
56 57 2 0.1090 1.2300e+07
56 58 2 0.1090 1.2300e+07
56 59 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 16 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 14 1
8 15 1
8 17 1
8 18 1
8 19 1
8 41 1
9 12 1
9 13 1
9 16 1
10 12 1
10 13 1
10 16 1
11 20 1
11 21 1
11 22 1

11 42 1
11 43 1
11 44 1
12 14 1
12 15 1
12 17 1
12 18 1
12 19 1
12 41 1
13 17 1
13 18 1
13 23 1
13 24 1
13 25 1
13 41 1
14 16 1
14 20 1
14 21 1
14 22 1
15 16 1
15 20 1
15 21 1
15 22 1
16 19 1
16 45 1
16 46 1
16 47 1
17 42 1
17 43 1
17 44 1
18 42 1
18 43 1
18 44 1
19 26 1
19 27 1
19 28 1
20 23 1
20 24 1
20 25 1
21 23 1
21 24 1
21 25 1
22 29 1
22 30 1
22 31 1
23 26 1
23 27 1
23 28 1
24 26 1
24 27 1
24 28 1
25 32 1
25 33 1
25 34 1
26 29 1
26 30 1
26 31 1
27 29 1
27 30 1
27 31 1
28 35 1
28 36 1
28 37 1
29 32 1
29 33 1
29 34 1
30 32 1
30 33 1
30 34 1
31 38 1
31 39 1
31 40 1
32 35 1
32 36 1
32 37 1
33 35 1
33 36 1
33 37 1
35 38 1
35 39 1
35 40 1
36 38 1
36 39 1
36 40 1
41 48 1
41 49 1
41 50 1
42 45 1
42 46 1

42 47 1
43 45 1
43 46 1
43 47 1
44 51 1
44 52 1
44 53 1
45 48 1
45 49 1
45 50 1
46 48 1
46 49 1
46 50 1
47 54 1
47 55 1
47 56 1
48 51 1
48 52 1
48 53 1
49 51 1
49 52 1
49 53 1
50 57 1
50 58 1
50 59 1
51 54 1
51 55 1
51 56 1
52 54 1
52 55 1
52 56 1
54 57 1
54 58 1
54 59 1
55 57 1
55 58 1
55 59 1

angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.30 632.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.30 632.00
4 2 5 2 111.30 632.00
2 5 6 2 111.00 530.00
2 5 7 2 111.00 530.00
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 104.00 490.00
6 5 8 2 109.00 1680.51
7 5 8 2 109.00 1680.51
5 8 9 2 110.00 4763.46
5 8 10 2 110.00 4763.46
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 107.57 484.00
9 8 11 2 108.53 443.00
10 8 11 2 108.53 443.00
8 11 12 2 108.00 465.00
8 11 13 2 111.00 530.00
8 11 16 2 111.00 530.00
12 11 13 2 108.00 465.00
12 11 16 2 108.00 465.00
13 11 16 2 111.00 530.00
11 13 14 2 109.00 1680.51
11 13 15 2 110.30 524.00
11 13 19 2 111.00 530.00
14 13 15 2 106.00 1733.55
14 13 19 2 110.00 4763.46
15 13 19 2 110.30 524.00
11 16 17 2 109.00 1680.51
11 16 18 2 110.30 524.00
11 16 41 2 111.00 530.00
17 16 18 2 106.00 1733.55
17 16 41 2 110.00 4763.46
18 16 41 2 110.30 524.00
13 19 20 2 108.53 443.00
13 19 21 2 110.00 4763.46
13 19 22 2 111.00 530.00
20 19 21 2 106.00 1733.55
20 19 22 2 111.00 530.00
21 19 22 2 110.00 4763.46
19 22 23 2 110.00 4763.46
19 22 24 2 110.00 4763.46
19 22 25 2 111.00 530.00
23 22 24 2 106.00 1733.55
23 22 25 2 110.00 4763.46
24 22 25 2 110.00 4763.46

```

```

22 25 26 2 110.00 4763.46
22 25 27 2 110.00 4763.46
22 25 28 2 111.00 530.00
26 25 27 2 106.00 1733.55
26 25 28 2 110.00 4763.46
27 25 28 2 110.00 4763.46
25 28 29 2 110.00 4763.46
25 28 30 2 110.00 4763.46
25 28 31 2 111.00 530.00
29 28 30 2 106.00 1733.55
29 28 31 2 110.00 4763.46
30 28 31 2 110.00 4763.46
28 31 32 2 110.00 4763.46
28 31 33 2 110.00 4763.46
28 31 34 2 111.00 530.00
32 31 33 2 106.00 1733.55
32 31 34 2 110.00 4763.46
33 31 34 2 110.00 4763.46
31 34 35 2 110.00 4763.46
31 34 36 2 110.00 4763.46
31 34 37 2 111.00 530.00
35 34 36 2 106.00 1733.55
35 34 37 2 110.00 4763.46
36 34 37 2 110.00 4763.46
34 37 38 2 111.30 632.00
34 37 39 2 111.30 632.00
34 37 40 2 111.30 632.00
38 37 39 2 107.57 484.00
38 37 40 2 107.57 484.00
39 37 40 2 107.57 484.00
16 41 42 2 108.53 443.00
16 41 43 2 110.00 4763.46
16 41 44 2 111.00 530.00
42 41 43 2 106.00 1733.55
42 41 44 2 110.30 524.00
43 41 44 2 110.00 4763.46
41 44 45 2 110.00 4763.46
41 44 46 2 110.00 4763.46
41 44 47 2 111.00 530.00
45 44 46 2 106.00 1733.55
45 44 47 2 110.00 4763.46
46 44 47 2 110.00 4763.46
44 47 48 2 110.00 4763.46
44 47 49 2 110.00 4763.46
44 47 50 2 111.00 530.00
48 47 49 2 106.00 1733.55
48 47 50 2 110.00 4763.46
49 47 50 2 110.00 4763.46
47 50 51 2 110.00 4763.46
47 50 52 2 110.00 4763.46
47 50 53 2 111.00 530.00
51 50 52 2 106.00 1733.55
51 50 53 2 110.00 4763.46
52 50 53 2 110.00 4763.46
50 53 54 2 110.00 4763.46
50 53 55 2 110.00 4763.46
50 53 56 2 111.00 530.00
54 53 55 2 106.00 1733.55
54 53 56 2 110.00 4763.46
55 53 56 2 110.00 4763.46
53 56 57 2 111.30 632.00
53 56 58 2 111.30 632.00
53 56 59 2 111.30 632.00
57 56 58 2 107.57 484.00
57 56 59 2 107.57 484.00
58 56 59 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 13 1 0.00 5.92 3
8 11 13 19 1 0.00 5.92 3
13 11 16 41 1 0.00 5.92 3
11 13 19 22 1 0.00 5.92 3
11 16 41 44 1 0.00 5.92 3
13 19 22 25 1 0.00 5.92 3
19 22 25 28 1 0.00 5.92 3
22 25 28 31 1 0.00 5.92 3
25 28 31 34 1 0.00 5.92 3
28 31 34 37 1 0.00 5.92 3
31 34 37 38 1 0.00 5.92 3
16 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 50 1 0.00 5.92 3
44 47 50 53 1 0.00 5.92 3
50 53 56 57 1 0.00 5.92 3
53 56 58 59 1 0.00 5.92 3
56 58 59 62 1 0.00 5.92 3
58 59 62 65 1 0.00 5.92 3
59 62 65 68 1 0.00 5.92 3
62 65 68 71 1 0.00 5.92 3
65 68 71 74 1 0.00 5.92 3
68 71 74 77 1 0.00 5.92 3
71 74 77 79 1 0.00 5.92 3
74 77 79 82 1 0.00 5.92 3
77 79 82 85 1 0.00 5.92 3
82 85 88 89 1 0.00 5.92 3
85 88 89 92 1 0.00 5.92 3
88 89 92 95 1 0.00 5.92 3
92 95 98 99 1 0.00 5.92 3
95 98 99 102 1 0.00 5.92 3
98 99 102 105 1 0.00 5.92 3
102 105 108 109 1 0.00 5.92 3
105 108 109 112 1 0.00 5.92 3
108 109 112 115 1 0.00 5.92 3
112 115 118 119 1 0.00 5.92 3
115 118 119 122 1 0.00 5.92 3
118 119 122 125 1 0.00 5.92 3
122 125 128 129 1 0.00 5.92 3
125 128 129 132 1 0.00 5.92 3
128 129 132 135 1 0.00 5.92 3
132 135 138 139 1 0.00 5.92 3
135 138 139 142 1 0.00 5.92 3
138 139 142 145 1 0.00 5.92 3
142 145 148 149 1 0.00 5.92 3
145 148 149 152 1 0.00 5.92 3
148 149 152 155 1 0.00 5.92 3
152 155 158 159 1 0.00 5.92 3
155 158 159 162 1 0.00 5.92 3
158 159 162 165 1 0.00 5.92 3
162 165 168 169 1 0.00 5.92 3
165 168 169 172 1 0.00 5.92 3
168 169 172 175 1 0.00 5.92 3
172 175 178 179 1 0.00 5.92 3
175 178 179 182 1 0.00 5.92 3
178 179 182 185 1 0.00 5.92 3
182 185 188 189 1 0.00 5.92 3
185 188 189 192 1 0.00 5.92 3
188 189 192 195 1 0.00 5.92 3
192 195 198 199 1 0.00 5.92 3
195 198 199 202 1 0.00 5.92 3
198 199 202 205 1 0.00 5.92 3
202 205 208 209 1 0.00 5.92 3
205 208 209 212 1 0.00 5.92 3
208 209 212 215 1 0.00 5.92 3
212 215 218 219 1 0.00 5.92 3
215 218 219 222 1 0.00 5.92 3
218 219 222 225 1 0.00 5.92 3
222 225 228 229 1 0.00 5.92 3
225 228 229 232 1 0.00 5.92 3
228 229 232 235 1 0.00 5.92 3
232 235 238 239 1 0.00 5.92 3
235 238 239 242 1 0.00 5.92 3
238 239 242 245 1 0.00 5.92 3
242 245 248 249 1 0.00 5.92 3
245 248 249 252 1 0.00 5.92 3
248 249 252 255 1 0.00 5.92 3
252 255 258 259 1 0.00 5.92 3
255 258 259 262 1 0.00 5.92 3
258 259 262 265 1 0.00 5.92 3
262 265 268 269 1 0.00 5.92 3
265 268 269 272 1 0.00 5.92 3
268 269 272 275 1 0.00 5.92 3
272 275 278 279 1 0.00 5.92 3
275 278 279 282 1 0.00 5.92 3
278 279 282 285 1 0.00 5.92 3
282 285 288 289 1 0.00 5.92 3
285 288 289 292 1 0.00 5.92 3
288 289 292 295 1 0.00 5.92 3
292 295 298 299 1 0.00 5.92 3
295 298 299 302 1 0.00 5.92 3
298 299 302 305 1 0.00 5.92 3
302 305 308 309 1 0.00 5.92 3
305 308 309 312 1 0.00 5.92 3
308 309 312 315 1 0.00 5.92 3
312 315 318 319 1 0.00 5.92 3
315 318 319 322 1 0.00 5.92 3
318 319 322 325 1 0.00 5.92 3
322 325 328 329 1 0.00 5.92 3
325 328 329 332 1 0.00 5.92 3
328 329 332 335 1 0.00 5.92 3
332 335 338 339 1 0.00 5.92 3
335 338 339 342 1 0.00 5.92 3
338 339 342 345 1 0.00 5.92 3
342 345 348 349 1 0.00 5.92 3
345 348 349 352 1 0.00 5.92 3
348 349 352 355 1 0.00 5.92 3
352 355 358 359 1 0.00 5.92 3
355 358 359 362 1 0.00 5.92 3
358 359 362 365 1 0.00 5.92 3
362 365 368 369 1 0.00 5.92 3
365 368 369 372 1 0.00 5.92 3
368 369 372 375 1 0.00 5.92 3
372 375 378 379 1 0.00 5.92 3
375 378 379 382 1 0.00 5.92 3
378 379 382 385 1 0.00 5.92 3
382 385 388 389 1 0.00 5.92 3
385 388 389 392 1 0.00 5.92 3
388 389 392 395 1 0.00 5.92 3
392 395 398 399 1 0.00 5.92 3
395 398 399 402 1 0.00 5.92 3
398 399 402 405 1 0.00 5.92 3
402 405 408 409 1 0.00 5.92 3
405 408 409 412 1 0.00 5.92 3
408 409 412 415 1 0.00 5.92 3
412 415 418 419 1 0.00 5.92 3
415 418 419 422 1 0.00 5.92 3
418 419 422 425 1 0.00 5.92 3
422 425 428 429 1 0.00 5.92 3
425 428 429 432 1 0.00 5.92 3
428 429 432 435 1 0.00 5.92 3
432 435 438 439 1 0.00 5.92 3
435 438 439 442 1 0.00 5.92 3
438 439 442 445 1 0.00 5.92 3
442 445 448 449 1 0.00 5.92 3
445 448 449 452 1 0.00 5.92 3
448 449 452 455 1 0.00 5.92 3
452 455 458 459 1 0.00 5.92 3
455 458 459 462 1 0.00 5.92 3
458 459 462 465 1 0.00 5.92 3
462 465 468 469 1 0.00 5.92 3
465 468 469 472 1 0.00 5.92 3
468 469 472 475 1 0.00 5.92 3
472 475 478 479 1 0.00 5.92 3
475 478 479 482 1 0.00 5.92 3
478 479 482 485 1 0.00 5.92 3
482 485 488 489 1 0.00 5.92 3
485 488 489 492 1 0.00 5.92 3
488 489 492 495 1 0.00 5.92 3
492 495 498 499 1 0.00 5.92 3
495 498 499 502 1 0.00 5.92 3
498 499 502 505 1 0.00 5.92 3
502 505 508 509 1 0.00 5.92 3
505 508 509 512 1 0.00 5.92 3
508 509 512 515 1 0.00 5.92 3
512 515 518 519 1 0.00 5.92 3
515 518 519 522 1 0.00 5.92 3
518 519 522 525 1 0.00 5.92 3
522 525 528 529 1 0.00 5.92 3
525 528 529 532 1 0.00 5.92 3
528 529 532 535 1 0.00 5.92 3
532 535 538 539 1 0.00 5.92 3
535 538 539 542 1 0.00 5.92 3
538 539 542 545 1 0.00 5.92 3
542 545 548 549 1 0.00 5.92 3
545 548 549 552 1 0.00 5.92 3
548 549 552 555 1 0.00 5.92 3
552 555 558 559 1 0.00 5.92 3
555 558 559 562 1 0.00 5.92 3
558 559 562 565 1 0.00 5.92 3
562 565 568 569 1 0.00 5.92 3
565 568 569 572 1 0.00 5.92 3
568 569 572 575 1 0.00 5.92 3
572 575 578 579 1 0.00 5.92 3
575 578 579 582 1 0.00 5.92 3
578 579 582 585 1 0.00 5.92 3
582 585 588 589 1 0.00 5.92 3
585 588 589 592 1 0.00 5.92 3
588 589 592 595 1 0.00 5.92 3
592 595 598 599 1 0.00 5.92 3
595 598 599 602 1 0.00 5.92 3
598 599 602 605 1 0.00 5.92 3
602 605 608 609 1 0.00 5.92 3
605 608 609 612 1 0.00 5.92 3
608 609 612 615 1 0.00 5.92 3
612 615 618 619 1 0.00 5.92 3
615 618 619 622 1 0.00 5.92 3
618 619 622 625 1 0.00 5.92 3
622 625 628 629 1 0.00 5.92 3
625 628 629 632 1 0.00 5.92 3
628 629 632 635 1 0.00 5.92 3
632 635 638 639 1 0.00 5.92 3
635 638 639 642 1 0.00 5.92 3
638 639 642 645 1 0.00 5.92 3
642 645 648 649 1 0.00 5.92 3
645 648 649 652 1 0.00 5.92 3
648 649 652 655 1 0.00 5.92 3
652 655 658 659 1 0.00 5.92 3
655 658 659 662 1 0.00 5.92 3
658 659 662 665 1 0.00 5.92 3
662 665 668 669 1 0.00 5.92 3
665 668 669 672 1 0.00 5.92 3
668 669 672 675 1 0.00 5.92 3
672 675 678 679 1 0.00 5.92 3
675 678 679 682 1 0.00 5.92 3
678 679 682 685 1 0.00 5.92 3
682 685 688 689 1 0.00 5.92 3
685 688 689 692 1 0.00 5.92 3
688 689 692 695 1 0.00 5.92 3
692 695 698 699 1 0.00 5.92 3
695 698 699 702 1 0.00 5.92 3
698 699 702 705 1 0.00 5.92 3
702 705 708 709 1 0.00 5.92 3
705 708 709 712 1 0.00 5.92 3
708 709 712 715 1 0.00 5.92 3
712 715 718 719 1 0.00 5.92 3
715 718 719 722 1 0.00 5.92 3
718 719 722 725 1 0.00 5.92 3
722 725 728 729 1 0.00 5.92 3
725 728 729 732 1 0.00 5.92 3
728 729 732 735 1 0.00 5.92 3
732 735 738 739 1 0.00 5.92 3
735 738 739 742 1 0.00 5.92 3
738 739 742 745 1 0.00 5.92 3
742 745 748 749 1 0.00 5.92 3
745 748 749 752 1 0.00 5.92 3
748 749 752 755 1 0.00 5.92 3
752 755 758 759 1 0.00 5.92 3
755 758 759 762 1 0.00 5.92 3
758 759 762 765 1 0.00 5.92 3
762 765 768 769 1 0.00 5.92 3
765 768 769 772 1 0.00 5.92 3
768 769 772 775 1 0.00 5.92 3
772 775 778 779 1 0.00 5.92 3
775 778 779 782 1 0.00 5.92 3
778 779 782 785 1 0.00 5.92 3
782 785 788 789 1 0.00 5.92 3
785 788 789 792 1 0.00 5.92 3
788 789 792 795 1 0.00 5.92 3
792 795 798 799 1 0.00 5.92 3
795 798 799 802 1 0.00 5.92 3
798 799 802 805 1 0.00 5.92 3
802 805 808 809 1 0.00 5.92 3
805 808 809 812 1 0.00 5.92 3
808 809 812 815 1 0.00 5.92 3
812 815 818 819 1 0.00 5.92 3
815 818 819 822 1 0.00 5.92 3
818 819 822 825 1 0.00 5.92 3
822 825 828 829 1 0.00 5.92 3
825 828 829 832 1 0.00 5.92 3
828 829 832 835 1 0.00 5.92 3
832 835 838 839 1 0.00 5.92 3
835 838 839 842 1 0.00 5.92 3
838 839 842 845 1 0.00 5.92 3
842 845 848 849 1 0.00 5.92 3
845 848 849 852 1 0.00 5.92 3
848 849 852 855 1 0.00 5.92 3
852 855 858 859 1 0.00 5.92 3
855 858 859 862 1 0.00 5.92 3
858 859 862 865 1 0.00 5.92 3
862 865 868 869 1 0.00 5.92 3
865 868 869 872 1 0.00 5.92 3
868 869 872 875 1 0.00 5.92 3
872 875 878 879 1 0.00 5.92 3
875 878 879 882 1 0.00 5.92 3
878 879 882 885 1 0.00 5.92 3
882 885 888 889 1 0.00 5.92 3
885 888 889 892 1 0.00 5.92 3
888 889 892 895 1 0.00 5.92 3
892 895 898 899 1 0.00 5.92 3
895 898 899 902 1 0.00 5.92 3
898 899 902 905 1 0.00 5.92 3
902 905 908 909 1 0.00 5.92 3
905 908 909 912 1 0.00 5.92 3
908 909 912 915 1 0.00 5.92 3
912 915 918 919 1 0.00 5.92 3
915 918 919 922 1 0.00 5.92 3
918 919 922 925 1 0.00 5.92 3
922 925 928 929 1 0.00 5.92 3
925 928 929 932 1 0.00 5.92 3
928 929 932 935 1 0.00 5.92 3
932 935 938 939 1 0.00 5.92 3
935 938 939 942 1 0.00 5.92 3
938 939 942 945 1 0.00 5.92 3
942 945 948 949 1 0.00 5.92 3
945 948 949 952 1 0.00 5.92 3
948 949 952 955 1 0.00 5.92 3
952 955 958 959 1 0.00 5.92 3
955 958 959 962 1 0.00 5.92 3
958 959 962 965 1 0.00 5.92 3
962 965 968 969 1 0.00 5.92 3
965 968 969 972 1 0.00 5.92 3
968 969 972 975 1 0.00 5.92 3
972 975 978 979 1 0.00 5.92 3
975 978 979 982 1 0.00 5.92 3
978 979 982 985 1 0.00 5.92 3
982 985 988 989 1 0.00 5.92 3
985 988 989 992 1 0.00 5.92 3
988 989 992 995 1 0.00 5.92 3
992 995 998 999 1 0.00 5.92 3
995 998 999 1000 1 0.00 5.92 3

clussions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c20 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_140 1 c20 H3 1 0.072 1.0080
2 opls_157 1 c20 C1 1 -0.213 12.0110
3 opls_140 1 c20 H1 1 0.072 1.0080
4 opls_140 1 c20 H2 1 0.072 1.0080
5 opls_158 1 c20 C2 1 -0.159 12.0110
6 opls_140 1 c20 H4 1 0.078 1.0080
7 opls_140 1 c20 H5 1 0.078 1.0080
8 opls_158 1 c20 C3 1 -0.158 12.0110
9 opls_140 1 c20 H6 1 0.079 1.0080
10 opls_140 1 c20 H7 1 0.079 1.0080
; -0.000
11 opls_158 1 c20 C4 2 -0.158
12.0110
12 opls_140 1 c20 H8 2 0.079 1.0080
13 opls_140 1 c20 H9 2 0.079 1.0080
14 opls_158 1 c20 C5 2 -0.158
12.0110
15 opls_140 1 c20 H10 2 0.079 1.0080
16 opls_140 1 c20 H11 2 0.079 1.0080
17 opls_158 1 c20 C6 2 -0.158
12.0110
18 opls_140 1 c20 H12 2 0.079 1.0080
19 opls_140 1 c20 H13 2 0.079 1.0080
; 0.000
20 opls_158 1 c20 C7 3 -0.158
12.0110
21 opls_140 1 c20 H14 3 0.079 1.0080
22 opls_140 1 c20 H15 3 0.079 1.0080
23 opls_158 1 c20 C8 3 -0.158
12.0110
24 opls_140 1 c20 H16 3 0.079 1.0080
25 opls_140 1 c20 H17 3 0.079 1.0080
26 opls_158 1 c20 C9 3 -0.158
12.0110
27 opls_140 1 c20 H18 3 0.079 1.0080
28 opls_140 1 c20 H19 3 0.079 1.0080
; 0.000
29 opls_158 1 c20 C10 4 -0.158
12.0110
30 opls_140 1 c20 H20 4 0.079 1.0080
31 opls_140 1 c20 H21 4 0.079 1.0080
32 opls_158 1 c20 C11 4 -0.158
12.0110
33 opls_140 1 c20 H22 4 0.079 1.0080
34 opls_140 1 c20 H23 4 0.079 1.0080
; 0.000
35 opls_158 1 c20 C12 5 -0.158
12.0110
36 opls_140 1 c20 H24 5 0.079 1.0080
37 opls_140 1 c20 H25 5 0.079 1.0080
38 opls_158 1 c20 C13 5 -0.158
12.0110
39 opls_140 1 c20 H26 5 0.079 1.0080
40 opls_140 1 c20 H27 5 0.079 1.0080
41 opls_158 1 c20 C14 5 -0.158
12.0110
42 opls_140 1 c20 H28 5 0.079 1.0080
43 opls_140 1 c20 H29 5 0.079 1.0080
; 0.000
44 opls_158 1 c20 C15 6 -0.158
12.0110
45 opls_140 1 c20 H30 6 0.079 1.0080
46 opls_140 1 c20 H31 6 0.079 1.0080
47 opls_158 1 c20 C16 6 -0.158
12.0110
48 opls_140 1 c20 H32 6 0.079 1.0080
49 opls_140 1 c20 H33 6 0.079 1.0080
50 opls_158 1 c20 C17 6 -0.158
12.0110
51 opls_140 1 c2
```

pairs

; ai aj funct ; all 1-4 pairs but  
the ones excluded in GROMOS itp

1 6 1  
1 7 1  
1 8 1  
2 9 1  
2 10 1  
2 11 1  
3 6 1  
3 7 1  
3 8 1  
4 6 1  
4 7 1  
4 8 1  
5 12 1  
5 13 1  
5 14 1  
6 9 1  
6 10 1  
6 11 1  
7 9 1  
7 10 1  
7 11 1  
8 15 1  
8 16 1  
8 17 1  
9 12 1  
9 13 1  
9 14 1  
10 12 1  
10 13 1  
10 14 1  
11 18 1  
11 19 1  
11 20 1  
12 15 1  
12 16 1  
12 17 1  
13 15 1  
13 16 1  
13 17 1  
14 21 1  
14 22 1  
14 23 1  
15 18 1  
15 19 1  
15 20 1  
16 18 1  
16 19 1  
16 20 1  
17 24 1  
17 25 1  
17 26 1  
18 21 1  
18 22 1  
18 23 1  
19 21 1  
19 22 1  
19 23 1  
20 27 1  
20 28 1  
20 29 1  
21 24 1  
21 25 1  
21 26 1  
22 24 1  
22 25 1  
22 26 1  
23 30 1  
23 31 1  
23 32 1  
24 27 1  
24 28 1  
24 29 1  
25 27 1  
25 28 1  
25 29 1  
26 33 1  
26 34 1  
26 35 1  
27 30 1  
27 31 1  
27 32 1  
28 30 1  
28 31 1  
28 32 1  
29 36 1

29 37 1  
29 38 1  
30 33 1  
30 34 1  
30 35 1  
31 33 1  
31 34 1  
31 35 1  
32 39 1  
32 40 1  
32 41 1  
33 36 1  
33 37 1  
33 38 1  
34 36 1  
34 37 1  
34 38 1  
35 42 1  
35 43 1  
35 44 1  
36 39 1  
36 40 1  
36 41 1  
37 39 1  
37 40 1  
37 41 1  
38 45 1  
38 46 1  
38 47 1  
39 42 1  
39 43 1  
39 44 1  
40 42 1  
40 43 1  
40 44 1  
41 48 1  
41 49 1  
41 50 1  
42 45 1  
42 46 1  
42 47 1  
43 45 1  
43 46 1  
43 47 1  
44 51 1  
44 52 1  
44 53 1  
45 48 1  
45 49 1  
45 50 1  
46 48 1  
46 49 1  
46 50 1  
47 54 1  
47 55 1  
47 56 1  
48 51 1  
48 52 1  
48 53 1  
49 51 1  
49 52 1  
49 53 1  
50 57 1  
50 58 1  
50 59 1  
51 54 1  
51 55 1  
51 56 1  
52 54 1  
52 55 1  
52 56 1  
53 60 1  
53 61 1  
53 62 1  
54 57 1  
54 58 1  
54 59 1  
55 57 1  
55 58 1  
55 59 1  
57 60 1  
57 61 1  
57 62 1  
58 60 1  
58 61 1  
58 62 1

angles

; ai aj ak funct angle fc

1 2 3 2 108.53 443.00  
1 2 4 2 108.53 443.00  
1 2 5 2 110.30 524.00  
3 2 4 2 108.53 443.00  
3 2 5 2 110.30 524.00  
4 2 5 2 110.30 524.00  
2 5 6 2 109.60 450.00  
2 5 7 2 109.60 450.00  
2 5 8 2 111.00 530.00  
6 5 7 2 107.00 2726.16  
6 5 8 2 109.50 285.00  
7 5 8 2 109.50 285.00  
5 8 9 2 109.50 285.00  
5 8 10 2 109.50 285.00  
5 8 11 2 111.00 530.00  
9 8 10 2 107.00 2726.16  
9 8 11 2 109.60 450.00  
10 8 11 2 109.60 450.00  
8 11 12 2 109.60 450.00  
8 11 13 2 109.60 450.00  
8 11 14 2 111.00 530.00  
12 11 13 2 107.00 2726.16  
12 11 14 2 109.60 450.00  
13 11 14 2 109.60 450.00  
11 14 15 2 109.60 450.00  
11 14 16 2 109.60 450.00  
11 14 17 2 111.00 530.00  
15 14 16 2 107.00 2726.16  
15 14 17 2 109.60 450.00  
16 14 17 2 109.60 450.00  
14 17 18 2 109.60 450.00  
14 17 19 2 109.60 450.00  
14 17 20 2 111.00 530.00  
18 17 19 2 107.00 2726.16  
18 17 20 2 109.60 450.00  
19 17 20 2 109.60 450.00  
17 20 21 2 109.60 450.00  
17 20 22 2 109.60 450.00  
17 20 23 2 111.00 530.00  
21 20 22 2 107.00 2726.16  
21 20 23 2 109.60 450.00  
22 20 23 2 109.60 450.00  
20 23 24 2 109.60 450.00  
20 23 25 2 109.60 450.00  
20 23 26 2 111.00 530.00  
24 23 25 2 107.00 2726.16  
24 23 26 2 109.60 450.00  
25 23 26 2 109.60 450.00  
23 26 27 2 109.60 450.00  
23 26 28 2 109.60 450.00  
23 26 29 2 111.00 530.00  
27 26 28 2 107.00 2726.16  
27 26 29 2 109.60 450.00  
28 26 29 2 109.60 450.00  
26 29 30 2 109.60 450.00  
26 29 31 2 109.60 450.00  
26 29 32 2 111.00 530.00  
30 29 31 2 107.00 2726.16  
30 29 32 2 109.60 450.00  
31 29 32 2 109.60 450.00  
29 32 33 2 109.60 450.00  
29 32 34 2 109.60 450.00  
29 32 35 2 111.00 530.00  
33 32 34 2 107.00 2726.16  
33 32 35 2 109.60 450.00  
34 32 35 2 109.60 450.00  
32 35 36 2 109.60 450.00  
32 35 37 2 109.60 450.00  
32 35 38 2 111.00 530.00  
36 35 37 2 107.00 2726.16  
36 35 38 2 109.60 450.00  
37 35 38 2 109.60 450.00  
35 38 39 2 109.60 450.00  
35 38 40 2 109.60 450.00  
35 38 41 2 111.00 530.00  
39 38 40 2 107.00 2726.16  
39 38 41 2 109.60 450.00  
40 38 41 2 109.60 450.00  
38 41 42 2 109.60 450.00  
38 41 43 2 109.60 450.00  
38 41 44 2 111.00 530.00  
42 41 43 2 107.00 2726.16  
42 41 44 2 109.60 450.00  
43 41 44 2 109.60 450.00  
41 44 45 2 109.60 450.00  
41 44 46 2 109.60 450.00  
41 44 47 2 111.00 530.00  
45 44 46 2 107.00 2726.16

```

45 44 47 2 109.60 450.00
46 44 47 2 109.60 450.00
44 47 48 2 109.60 450.00
44 47 49 2 109.60 450.00
44 47 50 2 111.00 530.00
48 47 49 2 107.00 2726.16
48 47 50 2 109.60 450.00
49 47 50 2 109.60 450.00
47 50 51 2 109.60 450.00
47 50 52 2 109.60 450.00
47 50 53 2 111.00 530.00
51 50 52 2 107.00 2726.16
51 50 53 2 109.60 450.00
52 50 53 2 109.60 450.00
50 53 54 2 109.60 450.00
50 53 55 2 109.60 450.00
50 53 56 2 111.00 530.00
54 53 55 2 107.00 2726.16
54 53 56 2 109.50 285.00
55 53 56 2 109.50 285.00
53 56 57 2 109.50 285.00
53 56 58 2 109.50 285.00
53 56 59 2 111.00 530.00
57 56 58 2 107.00 2726.16
57 56 59 2 109.60 450.00
58 56 59 2 109.60 450.00
56 59 60 2 110.30 524.00
56 59 61 2 110.30 524.00
56 59 62 2 110.30 524.00
60 59 61 2 108.53 443.00
60 59 62 2 108.53 443.00
61 59 62 2 108.53 443.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 44 1 0.00 5.92 3
38 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 50 1 0.00 5.92 3
44 47 50 53 1 0.00 5.92 3
47 50 53 56 1 0.00 5.92 3
50 53 56 59 1 0.00 5.92 3
53 56 59 60 1 0.00 5.92 3

clussions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c21 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opl.s.140 1 c21 H3 1 0.072 1.0080
2 opl.s.157 1 c21 C1 1 -0.210 12.0110
3 opl.s.140 1 c21 H1 1 0.072 1.0080
4 opl.s.140 1 c21 H2 1 0.072 1.0080
5 opl.s.158 1 c21 C2 1 -0.159 12.0110
6 opl.s.140 1 c21 H4 1 0.078 1.0080
7 opl.s.140 1 c21 H5 1 0.078 1.0080

8 opl.s.158 1 c21 C3 1 -0.158 12.0110
9 opl.s.140 1 c21 H6 1 0.079 1.0080
10 opl.s.140 1 c21 H7 1 0.079 1.0080
; 0.003
11 opl.s.158 1 c21 C4 2 -0.158
12.0110
12 opl.s.140 1 c21 H8 2 0.079 1.0080
13 opl.s.140 1 c21 H9 2 0.079 1.0080
14 opl.s.158 1 c21 C5 2 -0.158
12.0110
15 opl.s.140 1 c21 H10 2 0.079 1.0080
16 opl.s.140 1 c21 H11 2 0.079 1.0080
17 opl.s.158 1 c21 C6 2 -0.158
12.0110
18 opl.s.140 1 c21 H12 2 0.079 1.0080
19 opl.s.140 1 c21 H13 2 0.079 1.0080
; 0.000
20 opl.s.158 1 c21 C7 3 -0.158
12.0110
21 opl.s.140 1 c21 H14 3 0.079 1.0080
22 opl.s.140 1 c21 H15 3 0.079 1.0080
23 opl.s.158 1 c21 C8 3 -0.158
12.0110
24 opl.s.140 1 c21 H16 3 0.079 1.0080
25 opl.s.140 1 c21 H17 3 0.079 1.0080
26 opl.s.158 1 c21 C9 3 -0.158
12.0110
27 opl.s.140 1 c21 H18 3 0.079 1.0080
28 opl.s.140 1 c21 H19 3 0.079 1.0080
; 0.000
29 opl.s.158 1 c21 C10 4 -0.158
12.0110
30 opl.s.140 1 c21 H20 4 0.079 1.0080
31 opl.s.140 1 c21 H21 4 0.079 1.0080
32 opl.s.158 1 c21 C11 4 -0.164
12.0110
33 opl.s.140 1 c21 H22 4 0.079 1.0080
34 opl.s.140 1 c21 H23 4 0.079 1.0080
35 opl.s.158 1 c21 C12 4 -0.158
12.0110
36 opl.s.140 1 c21 H24 4 0.079 1.0080
37 opl.s.140 1 c21 H25 4 0.079 1.0080
; -0.006
38 opl.s.158 1 c21 C13 5 -0.158
12.0110
39 opl.s.140 1 c21 H26 5 0.079 1.0080
40 opl.s.140 1 c21 H27 5 0.079 1.0080
41 opl.s.158 1 c21 C14 5 -0.158
12.0110
42 opl.s.140 1 c21 H28 5 0.079 1.0080
43 opl.s.140 1 c21 H29 5 0.079 1.0080
44 opl.s.158 1 c21 C15 5 -0.158
12.0110
45 opl.s.140 1 c21 H30 5 0.079 1.0080
46 opl.s.140 1 c21 H31 5 0.079 1.0080
; 0.000
47 opl.s.158 1 c21 C16 6 -0.158
12.0110
48 opl.s.140 1 c21 H32 6 0.079 1.0080
49 opl.s.140 1 c21 H33 6 0.079 1.0080
50 opl.s.158 1 c21 C17 6 -0.158
12.0110
51 opl.s.140 1 c21 H34 6 0.079 1.0080
52 opl.s.140 1 c21 H35 6 0.079 1.0080
53 opl.s.158 1 c21 C18 6 -0.158
12.0110
54 opl.s.140 1 c21 H36 6 0.079 1.0080
55 opl.s.140 1 c21 H37 6 0.079 1.0080
; 0.000
56 opl.s.158 1 c21 C19 7 -0.158
12.0110
57 opl.s.140 1 c21 H38 7 0.079 1.0080
58 opl.s.140 1 c21 H39 7 0.079 1.0080
59 opl.s.158 1 c21 C20 7 -0.159
12.0110
60 opl.s.140 1 c21 H40 7 0.078 1.0080
61 opl.s.140 1 c21 H41 7 0.078 1.0080
62 opl.s.157 1 c21 C21 7 -0.210
12.0110
63 opl.s.140 1 c21 H42 7 0.072 1.0080
64 opl.s.140 1 c21 H43 7 0.072 1.0080
65 opl.s.140 1 c21 H44 7 0.072 1.0080
; 0.003
; total charge of the molecule:
-0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1120 3.7000e+07

2 3 2 0.1120 3.7000e+07
2 4 2 0.1120 3.7000e+07
2 5 2 0.1510 3.7279e+06
5 6 2 0.1120 3.7000e+07
5 7 2 0.1120 3.7000e+07
5 8 2 0.1520 5.4300e+06
8 9 2 0.1120 3.7000e+07
8 10 2 0.1120 3.7000e+07
8 11 2 0.1520 5.4300e+06
11 12 2 0.1120 3.7000e+07
11 13 2 0.1120 3.7000e+07
11 14 2 0.1520 5.4300e+06
14 15 2 0.1120 3.7000e+07
14 16 2 0.1120 3.7000e+07
14 17 2 0.1520 5.4300e+06
17 18 2 0.1120 3.7000e+07
17 19 2 0.1120 3.7000e+07
17 20 2 0.1520 5.4300e+06
20 21 2 0.1120 3.7000e+07
20 22 2 0.1120 3.7000e+07
20 23 2 0.1520 5.4300e+06
23 24 2 0.1120 3.7000e+07
23 25 2 0.1120 3.7000e+07
23 26 2 0.1520 5.4300e+06
26 27 2 0.1120 3.7000e+07
26 28 2 0.1120 3.7000e+07
26 29 2 0.1520 5.4300e+06
29 30 2 0.1120 3.7000e+07
29 31 2 0.1120 3.7000e+07
29 32 2 0.1520 5.4300e+06
32 33 2 0.1120 3.7000e+07
32 34 2 0.1120 3.7000e+07
32 35 2 0.1520 5.4300e+06
35 36 2 0.1120 3.7000e+07
35 37 2 0.1120 3.7000e+07
35 38 2 0.1520 5.4300e+06
38 39 2 0.1120 3.7000e+07
38 40 2 0.1120 3.7000e+07
38 41 2 0.1520 5.4300e+06
41 42 2 0.1120 3.7000e+07
41 43 2 0.1120 3.7000e+07
41 44 2 0.1520 5.4300e+06
44 45 2 0.1120 3.7000e+07
44 46 2 0.1120 3.7000e+07
44 47 2 0.1520 5.4300e+06
47 48 2 0.1120 3.7000e+07
47 49 2 0.1120 3.7000e+07
47 50 2 0.1520 5.4300e+06
50 51 2 0.1120 3.7000e+07
50 52 2 0.1120 3.7000e+07
50 53 2 0.1520 5.4300e+06
53 54 2 0.1120 3.7000e+07
53 55 2 0.1120 3.7000e+07
53 56 2 0.1520 5.4300e+06
56 57 2 0.1120 3.7000e+07
56 58 2 0.1120 3.7000e+07
56 59 2 0.1520 5.4300e+06
59 60 2 0.1120 3.7000e+07
59 61 2 0.1120 3.7000e+07
59 62 2 0.1510 3.7279e+06
62 63 2 0.1120 3.7000e+07
62 64 2 0.1120 3.7000e+07
62 65 2 0.1120 3.7000e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
2 9 1
2 10 1
2 11 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
1 6 1
1 7 1
1 8 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1

```

## ■ Heneicosano ( $C_{21}H_{44}$ )

7 9 1  
7 10 1  
7 11 1  
9 12 1  
9 13 1  
9 14 1  
11 18 1  
11 19 1  
11 20 1  
10 12 1  
10 13 1  
10 14 1  
12 15 1  
12 16 1  
12 17 1  
13 15 1  
13 16 1  
13 17 1  
14 21 1  
14 22 1  
14 23 1  
15 18 1  
15 19 1  
15 20 1  
17 24 1  
17 25 1  
17 26 1  
16 18 1  
16 19 1  
16 20 1  
18 21 1  
18 22 1  
18 23 1  
19 21 1  
19 22 1  
19 23 1  
20 27 1  
20 28 1  
20 29 1  
21 24 1  
21 25 1  
21 26 1  
23 30 1  
23 31 1  
23 32 1  
22 24 1  
22 25 1  
22 26 1  
24 27 1  
24 28 1  
24 29 1  
25 27 1  
25 28 1  
25 29 1  
26 33 1  
26 34 1  
26 35 1  
27 30 1  
27 31 1  
27 32 1  
29 36 1  
29 37 1  
29 38 1  
28 30 1  
28 31 1  
28 32 1  
30 33 1  
30 34 1  
30 35 1  
31 33 1  
31 34 1  
31 35 1  
32 39 1  
32 40 1  
32 41 1  
33 36 1  
33 37 1  
33 38 1  
35 42 1  
35 43 1  
35 44 1  
34 36 1  
34 37 1  
34 38 1  
36 39 1  
36 40 1  
36 41 1  
37 39 1  
37 40 1

37 41 1  
38 45 1  
38 46 1  
38 47 1  
39 42 1  
39 43 1  
39 44 1  
41 48 1  
41 49 1  
41 50 1  
40 42 1  
40 43 1  
40 44 1  
42 45 1  
42 46 1  
42 47 1  
43 45 1  
43 46 1  
43 47 1  
44 51 1  
44 52 1  
44 53 1  
45 48 1  
45 49 1  
45 50 1  
47 54 1  
47 55 1  
47 56 1  
46 48 1  
46 49 1  
46 50 1  
48 51 1  
48 52 1  
48 53 1  
49 51 1  
49 52 1  
49 53 1  
50 57 1  
50 58 1  
50 59 1  
51 54 1  
51 55 1  
51 56 1  
53 60 1  
53 61 1  
53 62 1  
52 54 1  
52 55 1  
52 56 1  
54 57 1  
54 58 1  
54 59 1  
55 57 1  
55 58 1  
55 59 1  
56 63 1  
56 64 1  
56 65 1  
57 60 1  
57 61 1  
57 62 1  
58 60 1  
58 61 1  
58 62 1  
60 63 1  
60 64 1  
60 65 1  
61 63 1  
61 64 1  
61 65 1

angles

```
; ai aj ak funct angle fc  
1 2 3 2 108.53 443.00  
1 2 4 2 108.53 443.00  
1 2 5 2 110.30 524.00  
3 2 4 2 108.53 443.00  
3 2 5 2 110.30 524.00  
4 2 5 2 110.30 524.00  
2 5 6 2 109.60 450.00  
2 5 7 2 109.60 450.00  
2 5 8 2 111.00 530.00  
6 5 7 2 107.00 2726.16  
6 5 8 2 109.50 285.00  
7 5 8 2 109.50 285.00  
5 8 9 2 109.50 285.00  
5 8 10 2 109.50 285.00  
5 8 11 2 111.00 530.00
```

9 8 10 2 107.00 2726.16  
9 8 11 2 109.60 450.00  
10 8 11 2 109.60 450.00  
8 11 12 2 109.60 450.00  
8 11 13 2 109.60 450.00  
8 11 14 2 111.00 530.00  
12 11 13 2 107.00 2726.16  
12 11 14 2 109.60 450.00  
13 11 14 2 109.60 450.00  
11 14 15 2 109.60 450.00  
11 14 16 2 109.60 450.00  
11 14 17 2 111.00 530.00  
15 14 16 2 107.00 2726.16  
15 14 17 2 109.60 450.00  
16 14 17 2 109.60 450.00  
14 17 18 2 109.60 450.00  
14 17 19 2 109.60 450.00  
14 17 20 2 111.00 530.00  
18 17 19 2 107.00 2726.16  
18 17 20 2 109.60 450.00  
19 17 20 2 109.60 450.00  
17 20 21 2 109.60 450.00  
17 20 22 2 109.60 450.00  
17 20 23 2 111.00 530.00  
21 20 22 2 107.00 2726.16  
21 20 23 2 109.60 450.00  
22 20 23 2 109.60 450.00  
20 23 24 2 109.60 450.00  
20 23 25 2 109.60 450.00  
20 23 26 2 111.00 530.00  
24 23 25 2 107.00 2726.16  
24 23 26 2 109.60 450.00  
25 23 26 2 109.60 450.00  
23 26 27 2 109.60 450.00  
23 26 28 2 109.60 450.00  
23 26 29 2 111.00 530.00  
27 26 28 2 107.00 2726.16  
27 26 29 2 109.60 450.00  
28 26 29 2 109.60 450.00  
26 29 30 2 109.60 450.00  
26 29 31 2 109.60 450.00  
26 29 32 2 111.00 530.00  
30 29 31 2 107.00 2726.16  
30 29 32 2 109.60 450.00  
31 29 32 2 109.60 450.00  
29 32 33 2 109.60 450.00  
29 32 34 2 109.60 450.00  
29 32 35 2 111.00 530.00  
33 32 34 2 107.00 2726.16  
33 32 35 2 109.60 450.00  
34 32 35 2 109.60 450.00  
32 35 36 2 109.60 450.00  
32 35 37 2 109.60 450.00  
32 35 38 2 111.00 530.00  
36 35 37 2 107.00 2726.16  
36 35 38 2 109.60 450.00  
37 35 38 2 109.60 450.00  
35 38 39 2 109.60 450.00  
35 38 40 2 109.60 450.00  
35 38 41 2 111.00 530.00  
39 38 40 2 107.00 2726.16  
39 38 41 2 109.60 450.00  
40 38 41 2 109.60 450.00  
38 41 42 2 109.60 450.00  
38 41 43 2 109.60 450.00  
38 41 44 2 111.00 530.00  
42 41 43 2 107.00 2726.16  
42 41 44 2 109.60 450.00  
43 41 44 2 109.60 450.00  
41 44 45 2 109.60 450.00  
41 44 46 2 109.60 450.00  
41 44 47 2 111.00 530.00  
45 44 46 2 107.00 2726.16  
45 44 47 2 109.60 450.00  
46 44 47 2 109.60 450.00  
44 47 48 2 109.60 450.00  
44 47 49 2 109.60 450.00  
44 47 50 2 111.00 530.00  
48 47 49 2 107.00 2726.16  
48 47 50 2 109.60 450.00  
49 47 50 2 109.60 450.00  
47 50 51 2 109.60 450.00  
47 50 52 2 109.60 450.00  
47 50 53 2 111.00 530.00  
51 50 52 2 107.00 2726.16  
51 50 53 2 109.60 450.00  
52 50 53 2 109.60 450.00  
50 53 54 2 109.60 450.00  
50 53 55 2 109.60 450.00

```

50 53 56 2 111.00 530.00
54 53 55 2 107.00 2726.16
54 53 56 2 109.60 450.00
55 53 56 2 109.60 450.00
53 56 57 2 109.60 450.00
53 56 58 2 109.60 450.00
53 56 59 2 111.00 530.00
57 56 58 2 107.00 2726.16
57 56 59 2 109.50 285.00
58 56 59 2 109.50 285.00
56 59 60 2 109.50 285.00
56 59 61 2 109.50 285.00
56 59 62 2 111.00 530.00
60 59 61 2 107.00 2726.16
60 59 62 2 109.60 450.00
61 59 62 2 109.60 450.00
59 62 63 2 110.30 524.00
59 62 64 2 110.30 524.00
59 62 65 2 110.30 524.00
63 62 64 2 108.53 443.00
63 62 65 2 108.53 443.00
64 62 65 2 108.53 443.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 44 1 0.00 5.92 3
38 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 50 1 0.00 5.92 3
44 47 50 53 1 0.00 5.92 3
47 50 53 56 1 0.00 5.92 3
50 53 56 59 1 0.00 5.92 3
53 56 59 62 1 0.00 5.92 3
56 59 62 63 1 0.00 5.92 3

clussions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c22 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opl.s.140 1 c22 H3 1 0.037 1.0080
2 opl.s.157 1 c22 C1 1 -0.108 12.0110
3 opl.s.140 1 c22 H1 1 0.037 1.0080
4 opl.s.140 1 c22 H2 1 0.037 1.0080
5 opl.s.158 1 c22 C2 1 -0.098 12.0110
6 opl.s.140 1 c22 H4 1 0.048 1.0080
7 opl.s.140 1 c22 H5 1 0.048 1.0080
8 opl.s.158 1 c22 C3 1 -0.103 12.0110
9 opl.s.140 1 c22 H6 1 0.051 1.0080
10 opl.s.140 1 c22 H7 1 0.051 1.0080
; -0.000
11 opl.s.158 1 c22 C4 2 -0.102
12.0110
12 opl.s.140 1 c22 H8 2 0.051 1.0080
13 opl.s.140 1 c22 H9 2 0.051 1.0080
14 opl.s.158 1 c22 C5 2 -0.102

12.0110
15 opl.s.140 1 c22 H10 2 0.051 1.0080
16 opl.s.140 1 c22 H11 2 0.051 1.0080
17 opl.s.158 1 c22 C6 2 -0.102
12.0110
18 opl.s.140 1 c22 H12 2 0.051 1.0080
19 opl.s.140 1 c22 H13 2 0.051 1.0080
; 0.000
20 opl.s.158 1 c22 C7 3 -0.102
12.0110
21 opl.s.140 1 c22 H14 3 0.051 1.0080
22 opl.s.140 1 c22 H15 3 0.051 1.0080
23 opl.s.158 1 c22 C8 3 -0.102
12.0110
24 opl.s.140 1 c22 H16 3 0.051 1.0080
25 opl.s.140 1 c22 H17 3 0.051 1.0080
26 opl.s.158 1 c22 C9 3 -0.102
12.0110
27 opl.s.140 1 c22 H18 3 0.051 1.0080
28 opl.s.140 1 c22 H19 3 0.051 1.0080
; 0.000
29 opl.s.158 1 c22 C10 4 -0.102
12.0110
30 opl.s.140 1 c22 H20 4 0.051 1.0080
31 opl.s.140 1 c22 H21 4 0.051 1.0080
32 opl.s.158 1 c22 C11 4 -0.102
12.0110
33 opl.s.140 1 c22 H22 4 0.051 1.0080
34 opl.s.140 1 c22 H23 4 0.051 1.0080
35 opl.s.158 1 c22 C12 4 -0.102
12.0110
36 opl.s.140 1 c22 H24 4 0.051 1.0080
37 opl.s.140 1 c22 H25 4 0.051 1.0080
; 0.000
38 opl.s.158 1 c22 C13 5 -0.102
12.0110
39 opl.s.140 1 c22 H26 5 0.051 1.0080
40 opl.s.140 1 c22 H27 5 0.051 1.0080
41 opl.s.158 1 c22 C14 5 -0.102
12.0110
42 opl.s.140 1 c22 H28 5 0.051 1.0080
43 opl.s.140 1 c22 H29 5 0.051 1.0080
; 0.000
44 opl.s.158 1 c22 C15 6 -0.102
12.0110
45 opl.s.140 1 c22 H30 6 0.051 1.0080
46 opl.s.140 1 c22 H31 6 0.051 1.0080
47 opl.s.158 1 c22 C16 6 -0.102
12.0110
48 opl.s.140 1 c22 H32 6 0.051 1.0080
49 opl.s.140 1 c22 H33 6 0.051 1.0080
; 0.000
50 opl.s.158 1 c22 C17 7 -0.102
12.0110
51 opl.s.140 1 c22 H34 7 0.051 1.0080
52 opl.s.140 1 c22 H35 7 0.051 1.0080
53 opl.s.158 1 c22 C18 7 -0.102
12.0110
54 opl.s.140 1 c22 H36 7 0.051 1.0080
55 opl.s.140 1 c22 H37 7 0.051 1.0080
56 opl.s.158 1 c22 C19 7 -0.102
12.0110
57 opl.s.140 1 c22 H38 7 0.051 1.0080
58 opl.s.140 1 c22 H39 7 0.051 1.0080
; 0.000
59 opl.s.158 1 c22 C20 8 -0.103
12.0110
60 opl.s.140 1 c22 H40 8 0.051 1.0080
61 opl.s.140 1 c22 H41 8 0.051 1.0080
62 opl.s.158 1 c22 C21 8 -0.098
12.0110
63 opl.s.140 1 c22 H42 8 0.048 1.0080
64 opl.s.140 1 c22 H43 8 0.048 1.0080
65 opl.s.157 1 c22 C22 8 -0.108
12.0110
66 opl.s.140 1 c22 H44 8 0.037 1.0080
67 opl.s.140 1 c22 H45 8 0.037 1.0080
68 opl.s.140 1 c22 H46 8 0.037 1.0080
; -0.000
; total charge of the molecule:
-0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1520 5.4300e+06
5 6 2 0.1110 4.8697e+06

5 7 2 0.1110 4.8697e+06
5 8 2 0.1520 5.4300e+06
8 9 2 0.1110 4.8697e+06
8 10 2 0.1110 4.8697e+06
8 11 2 0.1520 5.4300e+06
11 12 2 0.1110 4.8697e+06
11 13 2 0.1110 4.8697e+06
11 14 2 0.1520 5.4300e+06
14 15 2 0.1110 4.8697e+06
14 16 2 0.1110 4.8697e+06
14 17 2 0.1520 5.4300e+06
17 18 2 0.1110 4.8697e+06
17 19 2 0.1110 4.8697e+06
17 20 2 0.1520 5.4300e+06
20 21 2 0.1110 4.8697e+06
20 22 2 0.1110 4.8697e+06
20 23 2 0.1520 5.4300e+06
23 24 2 0.1110 4.8697e+06
23 25 2 0.1110 4.8697e+06
23 26 2 0.1520 5.4300e+06
26 27 2 0.1110 4.8697e+06
26 28 2 0.1110 4.8697e+06
26 29 2 0.1520 5.4300e+06
29 30 2 0.1110 4.8697e+06
29 31 2 0.1110 4.8697e+06
29 32 2 0.1520 5.4300e+06
32 33 2 0.1110 4.8697e+06
32 34 2 0.1110 4.8697e+06
32 35 2 0.1520 5.4300e+06
35 36 2 0.1110 4.8697e+06
35 37 2 0.1110 4.8697e+06
35 38 2 0.1520 5.4300e+06
38 39 2 0.1110 4.8697e+06
38 40 2 0.1110 4.8697e+06
38 41 2 0.1520 5.4300e+06
41 42 2 0.1110 4.8697e+06
41 43 2 0.1110 4.8697e+06
41 44 2 0.1520 5.4300e+06
44 45 2 0.1110 4.8697e+06
44 46 2 0.1110 4.8697e+06
44 47 2 0.1520 5.4300e+06
47 48 2 0.1110 4.8697e+06
47 49 2 0.1110 4.8697e+06
47 50 2 0.1520 5.4300e+06
50 51 2 0.1110 4.8697e+06
50 52 2 0.1110 4.8697e+06
50 53 2 0.1520 5.4300e+06
53 54 2 0.1110 4.8697e+06
53 55 2 0.1110 4.8697e+06
53 56 2 0.1520 5.4300e+06
56 57 2 0.1110 4.8697e+06
56 58 2 0.1110 4.8697e+06
56 59 2 0.1520 5.4300e+06
59 60 2 0.1110 4.8697e+06
59 61 2 0.1110 4.8697e+06
59 62 2 0.1520 5.4300e+06
62 63 2 0.1110 4.8697e+06
62 64 2 0.1110 4.8697e+06
62 65 2 0.1520 5.4300e+06
65 66 2 0.1090 1.2300e+07
65 67 2 0.1090 1.2300e+07
65 68 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1

```

■ Docosano ( $C_{22}H_{46}$ )

8 16 1  
8 17 1  
9 12 1  
9 13 1  
9 14 1  
10 12 1  
10 13 1  
10 14 1  
11 18 1  
11 19 1  
11 20 1  
12 15 1  
12 16 1  
12 17 1  
13 15 1  
13 16 1  
13 17 1  
14 21 1  
14 22 1  
14 23 1  
15 18 1  
15 19 1  
15 20 1  
16 18 1  
16 19 1  
16 20 1  
17 24 1  
17 25 1  
17 26 1  
18 21 1  
18 22 1  
18 23 1  
19 21 1  
19 22 1  
19 23 1  
20 27 1  
20 28 1  
20 29 1  
21 24 1  
21 25 1  
21 26 1  
22 24 1  
22 25 1  
22 26 1  
23 30 1  
23 31 1  
23 32 1  
24 27 1  
24 28 1  
24 29 1  
25 27 1  
25 28 1  
25 29 1  
26 33 1  
26 34 1  
26 35 1  
27 30 1  
27 31 1  
27 32 1  
28 30 1  
28 31 1  
28 32 1  
29 36 1  
29 37 1  
29 38 1  
30 33 1  
30 34 1  
30 35 1  
31 33 1  
31 34 1  
31 35 1  
32 39 1  
32 40 1  
32 41 1  
33 36 1  
33 37 1  
33 38 1  
34 36 1  
34 37 1  
34 38 1  
35 42 1  
35 43 1  
35 44 1  
36 39 1  
36 40 1  
36 41 1  
37 39 1  
37 40 1  
37 41 1

angles

38 45 1  
38 46 1  
38 47 1  
39 42 1  
39 43 1  
39 44 1  
40 42 1  
40 43 1  
40 44 1  
41 48 1  
41 49 1  
41 50 1  
42 45 1  
42 46 1  
42 47 1  
43 45 1  
43 46 1  
43 47 1  
44 51 1  
44 52 1  
44 53 1  
45 48 1  
45 49 1  
45 50 1  
46 48 1  
46 49 1  
46 50 1  
47 54 1  
47 55 1  
47 56 1  
48 51 1  
48 52 1  
48 53 1  
49 51 1  
49 52 1  
49 53 1  
50 57 1  
50 58 1  
50 59 1  
51 54 1  
51 55 1  
51 56 1  
52 54 1  
52 55 1  
52 56 1  
53 60 1  
53 61 1  
53 62 1  
54 57 1  
54 58 1  
54 59 1  
55 57 1  
55 58 1  
55 59 1  
56 63 1  
56 64 1  
56 65 1  
57 60 1  
57 61 1  
57 62 1  
58 60 1  
58 61 1  
58 62 1  
59 66 1  
59 67 1  
59 68 1  
60 63 1  
60 64 1  
60 65 1  
61 63 1  
61 64 1  
61 65 1  
63 66 1  
63 67 1  
63 68 1  
64 66 1  
64 67 1  
64 68 1  
  
; ai aj ak funct angle fc  
1 2 3 2 107.57 484.00  
1 2 4 2 107.57 484.00  
1 2 5 2 111.30 632.00  
3 2 4 2 107.57 484.00  
3 2 5 2 111.30 632.00  
4 2 5 2 111.30 632.00  
2 5 6 2 110.00 4763.46

2 5 7 2 110.00 4763.46  
2 5 8 2 111.00 530.00  
6 5 7 2 106.00 1733.55  
6 5 8 2 110.00 4763.46  
7 5 8 2 110.00 4763.46  
5 8 9 2 110.00 4763.46  
5 8 10 2 110.00 4763.46  
5 8 11 2 111.00 530.00  
9 8 10 2 106.00 1733.55  
9 8 11 2 110.00 4763.46  
10 8 11 2 110.00 4763.46  
8 11 12 2 110.00 4763.46  
8 11 13 2 110.00 4763.46  
8 11 14 2 111.00 530.00  
12 11 13 2 106.00 1733.55  
12 11 14 2 110.00 4763.46  
13 11 14 2 110.00 4763.46  
11 14 15 2 110.00 4763.46  
11 14 16 2 110.00 4763.46  
11 14 17 2 111.00 530.00  
15 14 16 2 106.00 1733.55  
15 14 17 2 110.00 4763.46  
16 14 17 2 110.00 4763.46  
14 17 18 2 110.00 4763.46  
14 17 19 2 110.00 4763.46  
14 17 20 2 111.00 530.00  
18 17 19 2 106.00 1733.55  
18 17 20 2 110.00 4763.46  
19 17 20 2 110.00 4763.46  
17 20 21 2 110.00 4763.46  
17 20 22 2 110.00 4763.46  
17 20 23 2 111.00 530.00  
21 20 22 2 106.00 1733.55  
21 20 23 2 110.00 4763.46  
22 20 23 2 110.00 4763.46  
20 23 24 2 110.00 4763.46  
20 23 25 2 110.00 4763.46  
20 23 26 2 111.00 530.00  
24 23 25 2 106.00 1733.55  
24 23 26 2 110.00 4763.46  
25 23 26 2 110.00 4763.46  
23 26 27 2 110.00 4763.46  
23 26 28 2 110.00 4763.46  
23 26 29 2 111.00 530.00  
27 26 28 2 106.00 1733.55  
27 26 29 2 110.00 4763.46  
28 26 29 2 110.00 4763.46  
26 29 30 2 110.00 4763.46  
26 29 31 2 110.00 4763.46  
26 29 32 2 111.00 530.00  
30 29 31 2 106.00 1733.55  
30 29 32 2 110.00 4763.46  
31 29 32 2 110.00 4763.46  
29 32 33 2 110.00 4763.46  
29 32 34 2 110.00 4763.46  
29 32 35 2 111.00 530.00  
33 32 34 2 106.00 1733.55  
33 32 35 2 110.00 4763.46  
34 32 35 2 110.00 4763.46  
32 35 36 2 110.00 4763.46  
32 35 37 2 110.00 4763.46  
32 35 38 2 111.00 530.00  
36 35 37 2 106.00 1733.55  
36 35 38 2 110.00 4763.46  
37 35 38 2 110.00 4763.46  
35 38 39 2 110.00 4763.46  
35 38 40 2 110.00 4763.46  
35 38 41 2 111.00 530.00  
39 38 40 2 106.00 1733.55  
39 38 41 2 110.00 4763.46  
40 38 41 2 110.00 4763.46  
38 41 42 2 110.00 4763.46  
38 41 43 2 110.00 4763.46  
38 41 44 2 111.00 530.00  
42 41 43 2 106.00 1733.55  
42 41 44 2 110.00 4763.46  
43 41 44 2 110.00 4763.46  
41 44 45 2 110.00 4763.46  
41 44 46 2 110.00 4763.46  
41 44 47 2 111.00 530.00  
45 44 46 2 106.00 1733.55  
45 44 47 2 110.00 4763.46  
46 44 47 2 110.00 4763.46  
44 47 48 2 110.00 4763.46  
44 47 49 2 110.00 4763.46  
44 47 50 2 111.00 530.00  
48 47 49 2 106.00 1733.55  
48 47 50 2 110.00 4763.46  
49 47 50 2 110.00 4763.46

```

47 50 51 2 110.00 4763.46
47 50 52 2 110.00 4763.46
47 50 53 2 111.00 530.00
51 50 52 2 106.00 1733.55
51 50 53 2 110.00 4763.46
52 50 53 2 110.00 4763.46
50 53 54 2 110.00 4763.46
50 53 55 2 110.00 4763.46
50 53 56 2 111.00 530.00
54 53 55 2 106.00 1733.55
54 53 56 2 110.00 4763.46
55 53 56 2 110.00 4763.46
53 56 57 2 110.00 4763.46
53 56 58 2 110.00 4763.46
53 56 59 2 111.00 530.00
57 56 58 2 106.00 1733.55
57 56 59 2 110.00 4763.46
58 56 59 2 110.00 4763.46
56 59 60 2 110.00 4763.46
56 59 61 2 110.00 4763.46
56 59 62 2 111.00 530.00
60 59 61 2 106.00 1733.55
60 59 62 2 110.00 4763.46
61 59 62 2 110.00 4763.46
59 62 63 2 110.00 4763.46
59 62 64 2 110.00 4763.46
59 62 65 2 111.00 530.00
63 62 64 2 106.00 1733.55
63 62 65 2 110.00 4763.46
64 62 65 2 110.00 4763.46
62 65 66 2 111.30 632.00
62 65 67 2 111.30 632.00
62 65 68 2 111.30 632.00
66 65 67 2 107.57 484.00
66 65 68 2 107.57 484.00
67 65 68 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 44 1 0.00 5.92 3
38 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 50 1 0.00 5.92 3
44 47 50 53 1 0.00 5.92 3
47 50 53 56 1 0.00 5.92 3
50 53 56 59 1 0.00 5.92 3
53 56 59 62 1 0.00 5.92 3
56 59 62 65 1 0.00 5.92 3
59 62 65 66 1 0.00 5.92 3

exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype ]
; Name nrexcl
c23 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total.charge
1 opl.s.140 1 c23 H77 1 0.072 1.0080
2 opl.s.157 1 c23 C29 1 -0.072
12.0110
3 opl.s.140 1 c23 H75 1 0.072 1.0080
4 opl.s.140 1 c23 H76 1 0.072 1.0080
5 opl.s.272 1 c23 O28 1 -0.281
15.9994
6 opl.s.158 1 c23 C27 1 -0.027
12.0110
7 opl.s.140 1 c23 H73 1 0.082 1.0080
8 opl.s.140 1 c23 H74 1 0.082 1.0080
; -0.000
9 opl.s.158 1 c23 C26 2 -0.023
12.0110
10 opl.s.140 1 c23 H71 2 0.082 1.0080
11 opl.s.140 1 c23 H72 2 0.082 1.0080
12 opl.s.272 1 c23 O25 2 -0.285
15.9994
13 opl.s.158 1 c23 C24 2 -0.022
12.0110
14 opl.s.140 1 c23 H69 2 0.083 1.0080
15 opl.s.140 1 c23 H70 2 0.083 1.0080
; 0.000
16 opl.s.158 1 c23 C23 3 -0.023
12.0110
17 opl.s.140 1 c23 H67 3 0.083 1.0080
18 opl.s.140 1 c23 H68 3 0.083 1.0080
19 opl.s.272 1 c23 O22 3 -0.285
15.9994
20 opl.s.158 1 c23 C21 3 -0.024
12.0110
21 opl.s.140 1 c23 H65 3 0.083 1.0080
22 opl.s.140 1 c23 H66 3 0.083 1.0080
; 0.000
23 opl.s.158 1 c23 C20 4 -0.023
12.0110
24 opl.s.140 1 c23 H63 4 0.082 1.0080
25 opl.s.140 1 c23 H64 4 0.082 1.0080
26 opl.s.272 1 c23 O19 4 -0.284
15.9994
27 opl.s.158 1 c23 C18 4 -0.021
12.0110
28 opl.s.140 1 c23 H61 4 0.082 1.0080
29 opl.s.140 1 c23 H62 4 0.082 1.0080
; 0.000
30 opl.s.158 1 c23 C17 5 -0.023
12.0110
31 opl.s.140 1 c23 H59 5 0.083 1.0080
32 opl.s.140 1 c23 H60 5 0.083 1.0080
33 opl.s.272 1 c23 O16 5 -0.285
15.9994
34 opl.s.158 1 c23 C15 5 -0.022
12.0110
35 opl.s.140 1 c23 H57 5 0.082 1.0080
36 opl.s.140 1 c23 H58 5 0.082 1.0080
; 0.000
37 opl.s.158 1 c23 C14 6 -0.023
12.0110
38 opl.s.140 1 c23 H55 6 0.081 1.0080
39 opl.s.140 1 c23 H56 6 0.081 1.0080
40 opl.s.272 1 c23 O13 6 -0.285
15.9994
41 opl.s.158 1 c23 C12 6 0.016
12.0110
42 opl.s.140 1 c23 H53 6 0.065 1.0080
43 opl.s.140 1 c23 H54 6 0.065 1.0080
; 0.000
44 opl.s.158 1 c23 C11 7 -0.162
12.0110
45 opl.s.140 1 c23 H51 7 0.094 1.0080
46 opl.s.140 1 c23 H52 7 0.094 1.0080
47 opl.s.158 1 c23 C10 7 -0.184
12.0110
48 opl.s.140 1 c23 H49 7 0.079 1.0080
49 opl.s.140 1 c23 H50 7 0.079 1.0080
; 0.000
50 opl.s.158 1 c23 C9 8 -0.162
12.0110
51 opl.s.140 1 c23 H47 8 0.081 1.0080
52 opl.s.140 1 c23 H48 8 0.081 1.0080
53 opl.s.158 1 c23 C8 8 -0.158
12.0110
54 opl.s.140 1 c23 H45 8 0.079 1.0080
55 opl.s.140 1 c23 H46 8 0.079 1.0080
56 opl.s.158 1 c23 C7 8 -0.158
12.0110
57 opl.s.140 1 c23 H43 8 0.079 1.0080
58 opl.s.140 1 c23 H44 8 0.079 1.0080
; 0.000
59 opl.s.158 1 c23 C6 9 -0.158
12.0110
60 opl.s.140 1 c23 H41 9 0.079 1.0080
61 opl.s.140 1 c23 H42 9 0.079 1.0080
62 opl.s.158 1 c23 C5 9 -0.158
12.0110
63 opl.s.140 1 c23 H39 9 0.079 1.0080
64 opl.s.140 1 c23 H40 9 0.079 1.0080
65 opl.s.158 1 c23 C4 9 -0.158
12.0110
66 opl.s.140 1 c23 H37 9 0.079 1.0080
67 opl.s.140 1 c23 H38 9 0.079 1.0080
; 0.000
68 opl.s.158 1 c23 C3 10 -0.161
12.0110
69 opl.s.140 1 c23 H35 10 0.079
1.0080
70 opl.s.140 1 c23 H36 10 0.079
1.0080
71 opl.s.158 1 c23 C2 10 -0.159
12.0110
72 opl.s.140 1 c23 H33 10 0.078
1.0080
73 opl.s.140 1 c23 H34 10 0.078
1.0080
74 opl.s.157 1 c23 C1 10 -0.210
12.0110
75 opl.s.140 1 c23 H30 10 0.072
1.0080
76 opl.s.140 1 c23 H31 10 0.072
1.0080
77 opl.s.140 1 c23 H32 10 0.072
1.0080 ; -0.000
; total charge of the molecule:
0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1120 3.7000e+07
2 3 2 0.1120 3.7000e+07
2 4 2 0.1120 3.7000e+07
2 5 2 0.1420 3.2236e+06
5 6 2 0.1430 8.1800e+06
6 7 2 0.1120 3.7000e+07
6 8 2 0.1120 3.7000e+07
6 9 2 0.1520 5.4300e+06
9 10 2 0.1120 3.7000e+07
9 11 2 0.1120 3.7000e+07
9 12 2 0.1430 8.1800e+06
12 13 2 0.1430 8.1800e+06
13 14 2 0.1120 3.7000e+07
13 15 2 0.1120 3.7000e+07
13 16 2 0.1520 5.4300e+06
16 17 2 0.1120 3.7000e+07
16 18 2 0.1120 3.7000e+07
16 19 2 0.1430 8.1800e+06
19 20 2 0.1430 8.1800e+06
20 21 2 0.1120 3.7000e+07
20 22 2 0.1120 3.7000e+07
20 23 2 0.1530 7.1500e+06
23 24 2 0.1120 3.7000e+07
23 25 2 0.1120 3.7000e+07
23 26 2 0.1430 8.1800e+06
26 27 2 0.1430 8.1800e+06
27 28 2 0.1120 3.7000e+07
27 29 2 0.1120 3.7000e+07
27 30 2 0.1520 5.4300e+06
30 31 2 0.1120 3.7000e+07
30 32 2 0.1120 3.7000e+07
30 33 2 0.1430 8.1800e+06
33 34 2 0.1430 8.1800e+06
34 35 2 0.1120 3.7000e+07
34 36 2 0.1120 3.7000e+07
34 37 2 0.1530 7.1500e+06
37 38 2 0.1120 3.7000e+07
37 39 2 0.1120 3.7000e+07
37 40 2 0.1430 8.1800e+06
40 41 2 0.1430 8.1800e+06
41 42 2 0.1120 3.7000e+07
41 43 2 0.1120 3.7000e+07
41 44 2 0.1520 5.4300e+06
44 45 2 0.1120 3.7000e+07
44 46 2 0.1120 3.7000e+07
44 47 2 0.1520 5.4300e+06
47 48 2 0.1120 3.7000e+07
47 49 2 0.1120 3.7000e+07
47 50 2 0.1520 5.4300e+06
50 51 2 0.1120 3.7000e+07
50 52 2 0.1120 3.7000e+07
50 53 2 0.1520 5.4300e+06
53 54 2 0.1120 3.7000e+07
53 55 2 0.1120 3.7000e+07

```

## ■ Tricosano ( $C_{23}H_{48}$ )

```
53 56 2 0.1520 5.4300e+06
56 57 2 0.1120 3.7000e+07
56 58 2 0.1120 3.7000e+07
56 59 2 0.1520 5.4300e+06
59 60 2 0.1120 3.7000e+07
59 61 2 0.1120 3.7000e+07
59 62 2 0.1520 5.4300e+06
62 63 2 0.1120 3.7000e+07
62 64 2 0.1120 3.7000e+07
62 65 2 0.1520 5.4300e+06
65 66 2 0.1120 3.7000e+07
65 67 2 0.1120 3.7000e+07
65 68 2 0.1520 5.4300e+06
68 69 2 0.1120 3.7000e+07
68 70 2 0.1120 3.7000e+07
68 71 2 0.1520 5.4300e+06
71 72 2 0.1120 3.7000e+07
71 73 2 0.1120 3.7000e+07
71 74 2 0.1510 3.7279e+06
74 75 2 0.1120 3.7000e+07
74 76 2 0.1120 3.7000e+07
74 77 2 0.1120 3.7000e+07
```

pairs

```
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
```

```
1 6 1
2 7 1
2 8 1
2 9 1
3 6 1
4 6 1
5 10 1
5 11 1
5 12 1
6 13 1
7 10 1
7 11 1
7 12 1
8 10 1
8 11 1
8 12 1
9 14 1
9 15 1
9 16 1
10 13 1
11 13 1
12 17 1
12 18 1
12 19 1
13 20 1
14 17 1
14 18 1
14 19 1
15 17 1
15 18 1
15 19 1
16 21 1
16 22 1
16 23 1
17 20 1
18 20 1
19 24 1
19 25 1
19 26 1
20 27 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1
23 28 1
23 29 1
23 30 1
24 27 1
25 27 1
26 31 1
26 32 1
26 33 1
27 34 1
28 31 1
28 32 1
28 33 1
29 31 1
29 32 1
29 33 1
30 35 1
```

```
30 36 1
30 37 1
31 34 1
32 34 1
33 38 1
33 39 1
33 40 1
34 41 1
35 38 1
35 39 1
35 40 1
36 38 1
36 39 1
36 40 1
37 42 1
37 43 1
37 44 1
38 41 1
39 41 1
40 45 1
40 46 1
40 47 1
41 48 1
41 49 1
41 50 1
42 45 1
42 46 1
42 47 1
43 45 1
43 46 1
43 47 1
44 51 1
44 52 1
44 53 1
45 48 1
45 49 1
45 50 1
46 48 1
46 49 1
46 50 1
47 54 1
47 55 1
47 56 1
48 51 1
48 52 1
48 53 1
49 51 1
49 52 1
49 53 1
50 57 1
50 58 1
50 59 1
51 54 1
51 55 1
51 56 1
52 54 1
52 55 1
52 56 1
53 60 1
53 61 1
53 62 1
54 57 1
54 58 1
54 59 1
55 57 1
55 58 1
55 59 1
56 63 1
56 64 1
56 65 1
57 60 1
57 61 1
57 62 1
58 60 1
58 61 1
58 62 1
59 66 1
59 67 1
59 68 1
60 63 1
60 64 1
60 65 1
61 63 1
61 64 1
61 65 1
62 69 1
62 70 1
62 71 1
63 66 1
```

```
63 67 1
63 68 1
64 66 1
64 67 1
64 68 1
65 72 1
65 73 1
65 74 1
66 69 1
66 70 1
66 71 1
67 69 1
67 70 1
67 71 1
68 75 1
68 76 1
68 77 1
69 72 1
69 73 1
69 74 1
70 72 1
70 73 1
70 74 1
72 75 1
72 76 1
72 77 1
73 75 1
73 76 1
73 77 1
```

angles

```
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 110.00 4763.46
1 2 4 2 110.00 4763.46
1 2 5 2 111.00 530.00
3 2 4 2 110.00 4763.46
3 2 5 2 111.00 530.00
4 2 5 2 111.00 530.00
2 5 6 2 109.50 450.00
5 6 7 2 110.00 4763.46
5 6 8 2 110.00 4763.46
5 6 9 2 109.50 520.00
7 6 8 2 109.60 450.00
7 6 9 2 111.00 530.00
8 6 9 2 111.00 530.00
6 9 10 2 111.00 530.00
6 9 11 2 111.00 530.00
6 9 12 2 109.50 520.00
10 9 11 2 109.60 450.00
10 9 12 2 110.30 524.00
11 9 12 2 110.30 524.00
9 12 13 2 109.50 450.00
12 13 14 2 110.30 524.00
12 13 15 2 110.30 524.00
12 13 16 2 109.50 520.00
14 13 15 2 109.60 450.00
14 13 16 2 110.30 524.00
15 13 16 2 110.30 524.00
13 16 17 2 110.30 524.00
13 16 18 2 110.30 524.00
13 16 19 2 109.50 520.00
17 16 18 2 109.60 450.00
17 16 19 2 110.30 524.00
18 16 19 2 110.30 524.00
16 19 20 2 109.50 450.00
19 20 21 2 110.30 524.00
19 20 22 2 110.30 524.00
19 20 23 2 109.50 520.00
21 20 22 2 109.60 450.00
21 20 23 2 110.30 524.00
22 20 23 2 110.30 524.00
20 23 24 2 110.30 524.00
20 23 25 2 110.30 524.00
20 23 26 2 109.50 520.00
24 23 25 2 109.60 450.00
24 23 26 2 110.00 4763.46
25 23 26 2 110.00 4763.46
23 26 27 2 109.50 450.00
26 27 28 2 110.30 524.00
26 27 29 2 110.30 524.00
26 27 30 2 109.50 520.00
28 27 29 2 109.60 450.00
28 27 30 2 110.30 524.00
29 27 30 2 110.30 524.00
27 30 31 2 110.30 524.00
27 30 32 2 110.30 524.00
27 30 33 2 109.50 520.00
31 30 32 2 109.60 450.00
```

```

31 30 33 2 110.30 524.00
32 30 33 2 110.30 524.00
30 33 34 2 109.50 450.00
33 34 35 2 110.00 4763.46
33 34 36 2 110.00 4763.46
33 34 37 2 109.50 520.00
35 34 36 2 109.60 450.00
35 34 37 2 111.00 530.00
36 34 37 2 111.00 530.00
34 37 38 2 111.00 530.00
34 37 39 2 111.00 530.00
34 37 40 2 109.50 520.00
38 37 39 2 109.50 285.00
38 37 40 2 110.30 524.00
39 37 40 2 110.30 524.00
37 40 41 2 109.50 450.00
40 41 42 2 109.60 450.00
40 41 43 2 109.60 450.00
40 41 44 2 109.50 520.00
42 41 43 2 109.00 1680.51
42 41 44 2 111.00 530.00
43 41 44 2 111.00 530.00
41 44 45 2 109.50 285.00
41 44 46 2 109.50 285.00
41 44 47 2 111.00 530.00
45 44 46 2 107.00 2726.16
45 44 47 2 110.30 524.00
46 44 47 2 110.30 524.00
44 47 48 2 109.60 450.00
44 47 49 2 109.60 450.00
44 47 50 2 111.00 530.00
48 47 49 2 107.00 2726.16
48 47 50 2 109.60 450.00
49 47 50 2 109.60 450.00
47 50 51 2 109.60 450.00
47 50 52 2 109.60 450.00
47 50 53 2 111.00 530.00
51 50 52 2 107.00 2726.16
51 50 53 2 109.60 450.00
52 50 53 2 109.60 450.00
50 53 54 2 109.60 450.00
50 53 55 2 109.60 450.00
50 53 56 2 111.00 530.00
54 53 55 2 107.00 2726.16
54 53 56 2 109.60 450.00
55 53 56 2 109.60 450.00
53 56 57 2 109.60 450.00
53 56 58 2 109.60 450.00
53 56 59 2 111.00 530.00
57 56 58 2 107.00 2726.16
57 56 59 2 109.60 450.00
58 56 59 2 109.60 450.00
56 59 60 2 109.60 450.00
56 59 61 2 109.60 450.00
56 59 62 2 111.00 530.00
60 59 61 2 107.00 2726.16
60 59 62 2 109.60 450.00
61 59 62 2 109.60 450.00
59 62 63 2 109.60 450.00
59 62 64 2 109.60 450.00
59 62 65 2 111.00 530.00
63 62 64 2 107.00 2726.16
63 62 65 2 109.60 450.00
64 62 65 2 109.60 450.00
62 65 66 2 109.60 450.00
62 65 67 2 109.60 450.00
62 65 68 2 111.00 530.00
66 65 67 2 107.00 2726.16
66 65 68 2 109.60 450.00
67 65 68 2 109.60 450.00
65 68 69 2 109.60 450.00
65 68 70 2 109.60 450.00
65 68 71 2 111.00 530.00
69 68 70 2 107.00 2726.16
69 68 71 2 109.50 285.00
70 68 71 2 109.50 285.00
68 71 72 2 109.50 285.00
68 71 73 2 109.50 285.00
68 71 74 2 111.00 530.00
72 71 73 2 107.00 2726.16
72 71 74 2 109.60 450.00
73 71 74 2 109.60 450.00
71 74 75 2 110.30 524.00
71 74 76 2 110.30 524.00
71 74 77 2 110.30 524.00
75 74 76 2 108.53 443.00
75 74 77 2 108.53 443.00
76 74 77 2 108.53 443.00

; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 6 1 0.00 1.26 3
2 5 6 9 1 0.00 1.26 3
5 6 9 12 1 180.00 1.00 3
6 9 12 13 1 0.00 1.26 3
9 12 13 16 1 0.00 1.26 3
12 13 16 19 1 180.00 1.00 3
13 16 19 20 1 0.00 1.26 3
16 19 20 23 1 0.00 1.26 3
19 20 23 26 1 180.00 1.00 3
20 23 26 27 1 0.00 1.26 3
23 26 27 30 1 0.00 1.26 3
26 27 30 33 1 180.00 1.00 3
27 30 33 34 1 0.00 1.26 3
30 33 34 37 1 0.00 1.26 3
33 34 37 40 1 180.00 1.00 3
34 37 40 41 1 0.00 1.26 3
37 40 41 44 1 0.00 1.26 3
40 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 50 1 0.00 5.92 3
44 47 50 53 1 0.00 5.92 3
47 50 53 56 1 0.00 5.92 3
50 53 56 59 1 0.00 5.92 3
53 56 59 62 1 0.00 5.92 3
56 59 62 65 1 0.00 5.92 3
59 62 65 68 1 0.00 5.92 3
62 65 68 71 1 0.00 5.92 3
65 68 71 74 1 0.00 5.92 3
68 71 74 75 1 0.00 5.92 3

clussions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c24 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total.charge
1 opls_140 1 c24 H7 1 0.072 1.0080
2 opls_157 1 c24 C3 1 -0.216 12.0110
3 opls_140 1 c24 H5 1 0.072 1.0080
4 opls_140 1 c24 H6 1 0.072 1.0080 ;
-0.000
5 opls_158 1 c24 C2 2 -0.107 12.0110
6 opls_140 1 c24 H4 2 0.099 1.0080
7 opls_157 1 c24 C1 2 -0.208 12.0110
8 opls_140 1 c24 H1 2 0.072 1.0080
9 opls_140 1 c24 H2 2 0.072 1.0080
10 opls_140 1 c24 H3 2 0.072 1.0080
; 0.000
11 opls_158 1 c24 C4 3 -0.152
12.0110
12 opls_140 1 c24 H8 3 0.081 1.0080
13 opls_140 1 c24 H9 3 0.079 1.0080
14 opls_158 1 c24 C5 3 -0.104
12.0110
15 opls_140 1 c24 H10 3 0.090 1.0080
16 opls_158 1 c24 C7 3 -0.154
12.0110
17 opls_140 1 c24 H14 3 0.081 1.0080
18 opls_140 1 c24 H15 3 0.079 1.0080
; 0.000
19 opls_157 1 c24 C6 4 -0.219
12.0110
20 opls_140 1 c24 H11 4 0.073 1.0080
21 opls_140 1 c24 H12 4 0.073 1.0080
22 opls_140 1 c24 H13 4 0.073 1.0080
; -0.000
23 opls_158 1 c24 C8 5 -0.104
12.0110

24 opls_140 1 c24 H16 5 0.094 1.0080
25 opls_157 1 c24 C9 5 -0.209
12.0110
26 opls_140 1 c24 H17 5 0.073 1.0080
27 opls_140 1 c24 H18 5 0.073 1.0080
28 opls_140 1 c24 H19 5 0.073 1.0080
; 0.000
29 opls_158 1 c24 C10 6 -0.153
12.0110
30 opls_140 1 c24 H20 6 0.081 1.0080
31 opls_140 1 c24 H21 6 0.079 1.0080
32 opls_158 1 c24 C11 6 -0.106
12.0110
33 opls_140 1 c24 H22 6 0.092 1.0080
34 opls_158 1 c24 C13 6 -0.153
12.0110
35 opls_140 1 c24 H26 6 0.080 1.0080
36 opls_140 1 c24 H27 6 0.080 1.0080
; 0.000
37 opls_157 1 c24 C12 7 -0.219
12.0110
38 opls_140 1 c24 H23 7 0.073 1.0080
39 opls_140 1 c24 H24 7 0.073 1.0080
40 opls_140 1 c24 H25 7 0.073 1.0080
; -0.000
41 opls_158 1 c24 C14 8 -0.106
12.0110
42 opls_140 1 c24 H28 8 0.096 1.0080
43 opls_157 1 c24 C15 8 -0.209
12.0110
44 opls_140 1 c24 H29 8 0.073 1.0080
45 opls_140 1 c24 H30 8 0.073 1.0080
46 opls_140 1 c24 H31 8 0.073 1.0080
; 0.000
47 opls_158 1 c24 C16 9 -0.153
12.0110
48 opls_140 1 c24 H32 9 0.080 1.0080
49 opls_140 1 c24 H33 9 0.081 1.0080
50 opls_158 1 c24 C17 9 -0.104
12.0110
51 opls_140 1 c24 H34 9 0.091 1.0080
52 opls_158 1 c24 C19 9 -0.155
12.0110
53 opls_140 1 c24 H38 9 0.081 1.0080
54 opls_140 1 c24 H39 9 0.079 1.0080
; 0.000
55 opls_157 1 c24 C18 10 -0.219
12.0110
56 opls_140 1 c24 H35 10 0.073
1.0080
57 opls_140 1 c24 H36 10 0.073
1.0080
58 opls_140 1 c24 H37 10 0.073
1.0080 ; -0.000
59 opls_158 1 c24 C20 11 -0.104
12.0110
60 opls_140 1 c24 H40 11 0.094
1.0080
61 opls_157 1 c24 C21 11 -0.209
12.0110
62 opls_140 1 c24 H41 11 0.073
1.0080
63 opls_140 1 c24 H42 11 0.073
1.0080
64 opls_140 1 c24 H43 11 0.073
1.0080 ; 0.000
65 opls_158 1 c24 C22 12 -0.155
12.0110
66 opls_140 1 c24 H44 12 0.081
1.0080
67 opls_140 1 c24 H45 12 0.076
1.0080
68 opls_158 1 c24 C23 12 -0.157
12.0110
69 opls_140 1 c24 H46 12 0.080
1.0080
70 opls_140 1 c24 H50 12 0.075
1.0080 ; 0.000
71 opls_157 1 c24 C24 13 -0.216
12.0110
72 opls_140 1 c24 H47 13 0.072
1.0080
73 opls_140 1 c24 H48 13 0.072
1.0080
74 opls_140 1 c24 H49 13 0.072
1.0080 ; -0.000
; total charge of the molecule:
0.000

```

## ■ Tetracosano ( $C_{24}H_{50}$ )

```

; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1120 3.7000e+07
2 3 2 0.1120 3.7000e+07
2 4 2 0.1120 3.7000e+07
2 5 2 0.1520 5.4300e+06
5 6 2 0.1130 7.0483e+06
5 7 2 0.1520 5.4300e+06
5 11 2 0.1530 7.1500e+06
7 8 2 0.1120 3.7000e+07
7 9 2 0.1120 3.7000e+07
7 10 2 0.1120 3.7000e+07
11 12 2 0.1120 3.7000e+07
11 13 2 0.1120 3.7000e+07
11 14 2 0.1520 5.4300e+06
14 15 2 0.1130 7.0483e+06
14 16 2 0.1530 7.1500e+06
14 19 2 0.1520 5.4300e+06
16 17 2 0.1120 3.7000e+07
16 18 2 0.1120 3.7000e+07
16 23 2 0.1520 5.4300e+06
19 20 2 0.1120 3.7000e+07
19 21 2 0.1120 3.7000e+07
19 22 2 0.1120 3.7000e+07
23 24 2 0.1130 7.0483e+06
23 25 2 0.1520 5.4300e+06
23 29 2 0.1530 7.1500e+06
25 26 2 0.1120 3.7000e+07
25 27 2 0.1120 3.7000e+07
25 28 2 0.1120 3.7000e+07
29 30 2 0.1120 3.7000e+07
29 31 2 0.1120 3.7000e+07
29 32 2 0.1520 5.4300e+06
32 33 2 0.1130 7.0483e+06
32 34 2 0.1520 5.4300e+06
32 37 2 0.1520 5.4300e+06
34 35 2 0.1120 3.7000e+07
34 36 2 0.1120 3.7000e+07
34 41 2 0.1520 5.4300e+06
37 38 2 0.1120 3.7000e+07
37 39 2 0.1120 3.7000e+07
37 40 2 0.1120 3.7000e+07
41 42 2 0.1130 7.0483e+06
41 43 2 0.1520 5.4300e+06
41 47 2 0.1530 7.1500e+06
43 44 2 0.1120 3.7000e+07
43 45 2 0.1120 3.7000e+07
43 46 2 0.1120 3.7000e+07
47 48 2 0.1120 3.7000e+07
47 49 2 0.1120 3.7000e+07
47 50 2 0.1520 5.4300e+06
50 51 2 0.1130 7.0483e+06
50 52 2 0.1530 7.1500e+06
50 55 2 0.1520 5.4300e+06
52 53 2 0.1120 3.7000e+07
52 54 2 0.1120 3.7000e+07
52 59 2 0.1520 5.4300e+06
55 56 2 0.1120 3.7000e+07
55 57 2 0.1120 3.7000e+07
55 58 2 0.1120 3.7000e+07
59 60 2 0.1130 7.0483e+06
59 61 2 0.1520 5.4300e+06
59 65 2 0.1520 5.4300e+06
61 62 2 0.1120 3.7000e+07
61 63 2 0.1120 3.7000e+07
61 64 2 0.1120 3.7000e+07
65 66 2 0.1120 3.7000e+07
65 67 2 0.1120 3.7000e+07
65 68 2 0.1520 5.4300e+06
68 69 2 0.1120 3.7000e+07
68 70 2 0.1120 3.7000e+07
68 71 2 0.1510 3.7279e+06
71 72 2 0.1120 3.7000e+07
71 73 2 0.1120 3.7000e+07
71 74 2 0.1120 3.7000e+07

pairs

; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 11 1
2 8 1
2 9 1
2 10 1
2 12 1
2 13 1
2 14 1

3 6 1
3 7 1
3 11 1
4 6 1
4 7 1
4 11 1
5 15 1
5 16 1
5 19 1
6 8 1
6 9 1
6 10 1
6 12 1
6 13 1
6 14 1
7 12 1
7 13 1
7 14 1
8 11 1
9 11 1
10 11 1
11 17 1
11 18 1
11 20 1
11 21 1
11 22 1
11 23 1
12 15 1
12 16 1
12 19 1
13 15 1
13 16 1
13 19 1
14 24 1
14 25 1
14 29 1
15 17 1
15 18 1
15 20 1
15 21 1
15 22 1
15 23 1
16 20 1
16 21 1
16 22 1
16 26 1
16 27 1
16 28 1
16 30 1
16 31 1
16 32 1
17 19 1
17 24 1
17 25 1
17 29 1
18 19 1
18 24 1
18 25 1
18 29 1
19 23 1
23 33 1
23 34 1
23 37 1
24 26 1
24 27 1
24 28 1
24 30 1
24 31 1
24 32 1
25 30 1
25 31 1
25 32 1
26 29 1
27 29 1
28 29 1
29 35 1
29 36 1
29 38 1
29 39 1
29 40 1
29 41 1
30 33 1
30 34 1
30 37 1
31 33 1
31 34 1
31 37 1
32 42 1
32 43 1

32 47 1
33 35 1
33 36 1
33 38 1
33 39 1
33 40 1
33 41 1
34 38 1
34 39 1
34 40 1
34 44 1
34 45 1
34 46 1
34 48 1
34 49 1
34 50 1
35 37 1
35 42 1
35 43 1
35 47 1
36 37 1
36 42 1
36 43 1
36 47 1
37 41 1
41 51 1
41 52 1
41 55 1
42 44 1
42 45 1
42 46 1
42 48 1
42 49 1
42 50 1
43 48 1
43 49 1
43 50 1
44 47 1
45 47 1
46 47 1
47 53 1
47 54 1
47 56 1
47 57 1
47 58 1
47 59 1
48 51 1
48 52 1
48 55 1
49 51 1
49 52 1
49 55 1
50 60 1
50 61 1
50 65 1
51 53 1
51 54 1
51 56 1
51 57 1
51 58 1
51 59 1
52 56 1
52 57 1
52 58 1
52 62 1
52 63 1
52 64 1
52 66 1
52 67 1
52 68 1
53 55 1
53 60 1
53 61 1
53 65 1
54 55 1
54 60 1
54 61 1
54 65 1
55 59 1
59 69 1
59 70 1
59 71 1
60 62 1
60 63 1
60 64 1
60 66 1
60 67 1
60 68 1
61 66 1

```

```

61 67 1
61 68 1
62 65 1
63 65 1
64 65 1
65 72 1
65 73 1
65 74 1
66 69 1
66 70 1
66 71 1
67 69 1
67 70 1
67 71 1
69 72 1
69 73 1
69 74 1
70 72 1
70 73 1
70 74 1

```

angles

```

; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 108.53 443.00
1 2 4 2 108.53 443.00
1 2 5 2 110.30 524.00
3 2 4 2 108.53 443.00
3 2 5 2 110.30 524.00
4 2 5 2 110.30 524.00
2 5 6 2 108.00 465.00
2 5 7 2 109.50 520.00
2 5 11 2 111.00 530.00
6 5 7 2 108.00 465.00
6 5 11 2 109.00 1680.51
7 5 11 2 111.00 530.00
5 7 8 2 110.30 524.00
5 7 9 2 110.30 524.00
5 7 10 2 110.30 524.00
8 7 9 2 108.53 443.00
8 7 10 2 108.53 443.00
9 7 10 2 108.53 443.00
5 11 12 2 110.00 4763.46
5 11 13 2 109.00 1680.51
5 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 107.00 2726.16
12 11 14 2 109.00 1680.51
13 11 14 2 108.00 465.00
11 14 15 2 108.00 465.00
11 14 16 2 109.50 520.00
11 14 19 2 111.00 530.00
15 14 16 2 109.00 1680.51
15 14 19 2 108.00 465.00
16 14 19 2 111.00 530.00
14 16 17 2 110.00 4763.46
14 16 18 2 109.50 285.00
14 16 23 2 111.00 530.00
17 16 18 2 106.75 503.00
17 16 23 2 109.00 1680.51
18 16 23 2 108.00 465.00
14 19 20 2 110.30 524.00
14 19 21 2 110.30 524.00
14 19 22 2 110.30 524.00
20 19 21 2 108.53 443.00
20 19 22 2 108.53 443.00
21 19 22 2 108.53 443.00
16 23 24 2 108.00 465.00
16 23 25 2 111.00 530.00
16 23 29 2 109.50 520.00
24 23 25 2 108.00 465.00
24 23 29 2 109.00 1680.51
25 23 29 2 111.00 530.00
23 25 26 2 110.30 524.00
23 25 27 2 110.30 524.00
23 25 28 2 110.30 524.00
26 25 27 2 108.53 443.00
26 25 28 2 108.53 443.00
27 25 28 2 108.53 443.00
23 29 30 2 110.00 4763.46
23 29 31 2 109.50 285.00
23 29 32 2 111.00 530.00
30 29 31 2 106.75 503.00
30 29 32 2 109.00 1680.51
31 29 32 2 108.00 465.00
29 32 33 2 108.53 443.00
29 32 34 2 109.50 520.00
29 32 37 2 111.00 530.00
33 32 34 2 108.53 443.00
33 32 37 2 108.53 443.00

```

dihedrals

```

34 32 37 2 111.00 530.00
32 34 35 2 109.00 1680.51
32 34 36 2 110.00 4763.46
32 34 41 2 111.00 530.00
35 34 36 2 107.00 2726.16
35 34 41 2 109.00 1680.51
36 34 41 2 109.00 1680.51
32 37 38 2 110.30 524.00
32 37 39 2 110.30 524.00
32 37 40 2 110.30 524.00
38 37 39 2 108.53 443.00
38 37 40 2 108.53 443.00
39 37 40 2 108.53 443.00
34 41 42 2 108.00 465.00
34 41 43 2 109.50 520.00
34 41 47 2 111.00 530.00
42 41 43 2 108.00 465.00
42 41 47 2 109.00 1680.51
43 41 47 2 111.00 530.00
41 43 44 2 110.30 524.00
41 43 45 2 110.30 524.00
41 43 46 2 110.30 524.00
44 43 45 2 108.53 443.00
44 43 46 2 108.53 443.00
45 43 46 2 108.53 443.00
41 47 48 2 110.00 4763.46
41 47 49 2 109.50 285.00
41 47 50 2 111.00 530.00
48 47 49 2 107.00 2726.16
48 47 50 2 109.00 1680.51
49 47 50 2 108.00 465.00
47 50 51 2 107.60 507.00
47 50 52 2 111.00 530.00
47 50 55 2 111.00 530.00
51 50 52 2 109.00 1680.51
51 50 55 2 108.00 465.00
52 50 55 2 111.00 530.00
50 52 53 2 110.00 4763.46
50 52 54 2 109.60 450.00
50 52 59 2 111.00 530.00
53 52 54 2 106.75 503.00
53 52 59 2 109.00 1680.51
54 52 59 2 108.53 443.00
50 55 56 2 110.30 524.00
50 55 57 2 110.30 524.00
50 55 58 2 110.30 524.00
56 55 57 2 108.53 443.00
56 55 58 2 108.53 443.00
57 55 58 2 108.53 443.00
52 59 60 2 108.53 443.00
52 59 61 2 111.00 530.00
52 59 65 2 109.50 520.00
60 59 61 2 108.53 443.00
60 59 65 2 108.00 465.00
61 59 65 2 111.00 530.00
59 61 62 2 110.30 524.00
59 61 63 2 110.30 524.00
59 61 64 2 110.30 524.00
62 61 63 2 108.53 443.00
62 61 64 2 108.53 443.00
63 61 64 2 108.53 443.00
59 65 66 2 109.00 1680.51
59 65 67 2 108.53 443.00
59 65 68 2 111.00 530.00
66 65 67 2 107.00 2726.16
66 65 68 2 110.00 4763.46
67 65 68 2 109.00 1680.51
65 68 69 2 110.00 4763.46
65 68 70 2 109.00 1680.51
65 68 71 2 111.00 530.00
69 68 70 2 106.75 503.00
69 68 71 2 109.50 285.00
70 68 71 2 109.00 1680.51
68 71 72 2 110.30 524.00
68 71 73 2 110.30 524.00
68 71 74 2 110.30 524.00
72 71 73 2 108.53 443.00
72 71 74 2 108.53 443.00
73 71 74 2 108.53 443.00

```

```

; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

```

dihedrals

```

; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 7 1 0.00 5.92 3
2 5 7 8 1 0.00 5.92 3

```

```

7 5 11 14 1 180.00 1.00 3
5 11 14 19 1 0.00 5.92 3
11 14 16 23 1 180.00 1.00 3
11 14 19 20 1 0.00 5.92 3
14 16 23 25 1 0.00 5.92 3
16 23 25 26 1 0.00 5.92 3
16 23 29 32 1 180.00 1.00 3
23 29 32 37 1 0.00 5.92 3
29 32 34 41 1 0.00 5.92 3
29 32 37 38 1 0.00 5.92 3
32 34 41 43 1 0.00 5.92 3
34 41 43 44 1 0.00 5.92 3
34 41 47 50 1 180.00 1.00 3
41 47 50 55 1 0.00 5.92 3
47 50 52 59 1 180.00 1.00 3
47 50 55 56 1 0.00 5.92 3
50 52 59 61 1 0.00 5.92 3
52 59 61 62 1 0.00 5.92 3
52 59 65 68 1 0.00 5.92 3
59 65 68 71 1 180.00 1.00 3
65 68 71 72 1 0.00 5.92 3

```

clusions

```

; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

```

## ■ Pentacosano ( $C_{25}H_{52}$ )

moleculetype

```

; Name nrexcl
c25 3

```

atoms

```

; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total.charge
1 opl.s.140 1 c25 H02 1 0.087 1.0080
2 opl.s.157 1 c25 C01 1 -0.249
12.0110
3 opl.s.140 1 c25 H03 1 0.087 1.0080
4 opl.s.140 1 c25 H01 1 0.087 1.0080
5 opl.s.158 1 c25 C02 1 0.023 12.0110
6 opl.s.140 1 c25 H06 1 0.078 1.0080
7 opl.s.272 1 c25 O01 1 -0.344
15.9994
8 opl.s.033 1 c25 H05 1 0.231 1.0080
; 0.000
9 opl.s.158 1 c25 C03 2 -0.186
12.0110
10 opl.s.140 1 c25 H04 2 0.097 1.0080
11 opl.s.140 1 c25 H07 2 0.096 1.0080
12 opl.s.158 1 c25 C04 2 0.035
12.0110
13 opl.s.140 1 c25 H14 2 0.094 1.0080
14 opl.s.272 1 c25 O13 2 -0.347
15.9994
15 opl.s.033 1 c25 H15 2 0.211 1.0080
; 0.000
16 opl.s.158 1 c25 C05 3 -0.186
12.0110
17 opl.s.140 1 c25 H08 3 0.095 1.0080
18 opl.s.140 1 c25 H11 3 0.094 1.0080
19 opl.s.158 1 c25 C06 3 0.036
12.0110
20 opl.s.140 1 c25 H18 3 0.093 1.0080
21 opl.s.272 1 c25 O03 3 -0.347
15.9994
22 opl.s.033 1 c25 H13 3 0.215 1.0080
; 0.000
23 opl.s.158 1 c25 C07 4 -0.187
12.0110
24 opl.s.140 1 c25 H12 4 0.093 1.0080
25 opl.s.140 1 c25 H151 4 0.095
1.0080
26 opl.s.158 1 c25 C08 4 0.036
12.0110
27 opl.s.140 1 c25 H28 4 0.094 1.0080
28 opl.s.272 1 c25 O27 4 -0.348
15.9994
29 opl.s.033 1 c25 H29 4 0.217 1.0080
; 0.000

```

```

30 opl_s_158 1 c25 C09 5 -0.187
12.0110
31 opl_s_140 1 c25 H16 5 0.093 1.0080
32 opl_s_140 1 c25 H19 5 0.094 1.0080
33 opl_s_158 1 c25 C10 5 0.036
12.0110
34 opl_s_140 1 c25 H22 5 0.093 1.0080
35 opl_s_272 1 c25 O05 5 -0.348
15.9994
36 opl_s_033 1 c25 H21 5 0.219 1.0080
; 0.000
37 opl_s_158 1 c25 C11 6 -0.186
12.0110
38 opl_s_140 1 c25 H20 6 0.093 1.0080
39 opl_s_140 1 c25 H23 6 0.094 1.0080
40 opl_s_158 1 c25 C12 6 0.036
12.0110
41 opl_s_140 1 c25 H42 6 0.093 1.0080
42 opl_s_272 1 c25 O41 6 -0.347
15.9994
43 opl_s_033 1 c25 H43 6 0.217 1.0080
; 0.000
44 opl_s_158 1 c25 C13 7 -0.186
12.0110
45 opl_s_140 1 c25 H24 7 0.092 1.0080
46 opl_s_140 1 c25 H27 7 0.093 1.0080
47 opl_s_158 1 c25 C14 7 0.037
12.0110
48 opl_s_140 1 c25 H30 7 0.094 1.0080
49 opl_s_272 1 c25 O07 7 -0.346
15.9994
50 opl_s_033 1 c25 H291 7 0.216
1.0080 ; 0.000
51 opl_s_158 1 c25 C15 8 -0.188
12.0110
52 opl_s_140 1 c25 H281 8 0.089
1.0080
53 opl_s_140 1 c25 H31 8 0.092 1.0080
54 opl_s_158 1 c25 C16 8 0.041
12.0110
55 opl_s_140 1 c25 H56 8 0.087 1.0080
56 opl_s_272 1 c25 O55 8 -0.335
15.9994
57 opl_s_033 1 c25 H57 8 0.214 1.0080
; -0.000
58 opl_s_158 1 c25 C17 9 -0.155
12.0110
59 opl_s_140 1 c25 H35 9 0.093 1.0080
60 opl_s_140 1 c25 H61 9 0.078 1.0080
61 opl_s_158 1 c25 C59 9 -0.157
12.0110
62 opl_s_140 1 c25 H121 9 0.076
1.0080
63 opl_s_140 1 c25 H122 9 0.068
1.0080
64 opl_s_158 1 c25 C121 9 -0.157
12.0110
65 opl_s_140 1 c25 H131 9 0.080
1.0080
66 opl_s_140 1 c25 H132 9 0.074
1.0080 ; -0.000
67 opl_s_158 1 c25 C122 10 -0.157
12.0110
68 opl_s_140 1 c25 H133 10 0.078
1.0080
69 opl_s_140 1 c25 H134 10 0.081
1.0080
70 opl_s_158 1 c25 C131 10 -0.157
12.0110
71 opl_s_140 1 c25 H141 10 0.079
1.0080
72 opl_s_140 1 c25 H142 10 0.077
1.0080
73 opl_s_158 1 c25 C71 10 -0.158
12.0110
74 opl_s_140 1 c25 H143 10 0.078
1.0080
75 opl_s_140 1 c25 H152 10 0.079
1.0080 ; 0.000
76 opl_s_158 1 c25 C141 11 -0.158
12.0110
77 opl_s_140 1 c25 H153 11 0.081
1.0080
78 opl_s_140 1 c25 H154 11 0.078
1.0080
79 opl_s_158 1 c25 C151 11 -0.159
12.0110
80 opl_s_140 1 c25 H161 11 0.077
1.0080

81 opl_s_140 1 c25 H162 11 0.078
1.0080
82 opl_s_157 1 c25 C152 11 -0.210
12.0110
83 opl_s_140 1 c25 H163 11 0.071
1.0080
84 opl_s_140 1 c25 H164 11 0.071
1.0080
85 opl_s_140 1 c25 H165 11 0.071
1.0080 ; -0.000
; total charge of the molecule:
0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1120 3.7000e+07
2 3 2 0.1120 3.7000e+07
2 4 2 0.1120 3.7000e+07
2 5 2 0.1520 5.4300e+06
5 6 2 0.1130 7.0483e+06
5 7 2 0.1430 8.1800e+06
5 9 2 0.1530 7.1500e+06
7 8 2 0.0971 7.9547e+06
9 10 2 0.1120 3.7000e+07
9 11 2 0.1120 3.7000e+07
9 12 2 0.1530 7.1500e+06
12 13 2 0.1130 7.0483e+06
12 14 2 0.1430 8.1800e+06
12 16 2 0.1530 7.1500e+06
14 15 2 0.0971 7.9547e+06
16 17 2 0.1120 3.7000e+07
16 18 2 0.1120 3.7000e+07
16 19 2 0.1530 7.1500e+06
19 20 2 0.1130 7.0483e+06
19 21 2 0.1430 8.1800e+06
19 23 2 0.1530 7.1500e+06
21 22 2 0.0971 7.9547e+06
23 24 2 0.1120 3.7000e+07
23 25 2 0.1120 3.7000e+07
23 26 2 0.1530 7.1500e+06
26 27 2 0.1130 7.0483e+06
26 28 2 0.1430 8.1800e+06
26 30 2 0.1530 7.1500e+06
28 29 2 0.0971 7.9547e+06
30 31 2 0.1120 3.7000e+07
30 32 2 0.1120 3.7000e+07
30 33 2 0.1530 7.1500e+06
33 34 2 0.1130 7.0483e+06
33 35 2 0.1430 8.1800e+06
33 37 2 0.1530 7.1500e+06
35 36 2 0.0971 7.9547e+06
37 38 2 0.1120 3.7000e+07
37 39 2 0.1120 3.7000e+07
37 40 2 0.1530 7.1500e+06
40 41 2 0.1130 7.0483e+06
40 42 2 0.1430 8.1800e+06
40 44 2 0.1530 7.1500e+06
42 43 2 0.0971 7.9547e+06
44 45 2 0.1120 3.7000e+07
44 46 2 0.1120 3.7000e+07
44 47 2 0.1530 7.1500e+06
47 48 2 0.1130 7.0483e+06
47 49 2 0.1430 8.1800e+06
47 51 2 0.1530 7.1500e+06
49 50 2 0.0971 7.9547e+06
51 52 2 0.1120 3.7000e+07
51 53 2 0.1120 3.7000e+07
51 54 2 0.1530 7.1500e+06
54 55 2 0.1130 7.0483e+06
54 56 2 0.1430 8.1800e+06
54 58 2 0.1530 7.1500e+06
56 57 2 0.0971 7.9547e+06
58 59 2 0.1120 3.7000e+07
58 60 2 0.1120 3.7000e+07
58 61 2 0.1520 5.4300e+06
61 62 2 0.1120 3.7000e+07
61 63 2 0.1120 3.7000e+07
61 64 2 0.1520 5.4300e+06
64 65 2 0.1120 3.7000e+07
64 66 2 0.1120 3.7000e+07
64 67 2 0.1520 5.4300e+06
67 68 2 0.1120 3.7000e+07
67 69 2 0.1120 3.7000e+07
67 70 2 0.1520 5.4300e+06
70 71 2 0.1120 3.7000e+07
70 72 2 0.1120 3.7000e+07
70 73 2 0.1520 5.4300e+06
73 74 2 0.1120 3.7000e+07
73 75 2 0.1120 3.7000e+07

73 76 2 0.1520 5.4300e+06
76 77 2 0.1120 3.7000e+07
76 78 2 0.1120 3.7000e+07
76 79 2 0.1520 5.4300e+06
79 80 2 0.1120 3.7000e+07
79 81 2 0.1120 3.7000e+07
79 82 2 0.1510 3.7279e+06
82 83 2 0.1120 3.7000e+07
82 84 2 0.1120 3.7000e+07
82 85 2 0.1120 3.7000e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
3 6 1
3 7 1
3 9 1
2 8 1
2 10 1
2 11 1
2 12 1
4 6 1
4 7 1
4 9 1
1 6 1
1 7 1
1 9 1
5 13 1
5 14 1
5 16 1
6 8 1
6 10 1
6 11 1
6 12 1
7 10 1
7 11 1
7 12 1
8 9 1
9 15 1
9 17 1
9 18 1
9 19 1
10 13 1
10 14 1
10 16 1
11 13 1
11 14 1
11 16 1
12 20 1
12 21 1
12 23 1
13 15 1
13 17 1
13 18 1
13 19 1
14 17 1
14 18 1
14 19 1
15 16 1
16 22 1
16 24 1
16 25 1
16 26 1
17 20 1
17 21 1
17 23 1
18 20 1
18 21 1
18 23 1
19 27 1
19 28 1
19 30 1
20 22 1
20 24 1
20 25 1
20 26 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 23 1
23 29 1
23 31 1
23 32 1
23 33 1
24 27 1
24 28 1
24 30 1
25 27 1

```



```

51 54 55 2 108.53 443.00
51 54 56 2 111.00 530.00
51 54 58 2 111.00 530.00
55 54 56 2 109.00 1680.51
55 54 58 2 110.30 524.00
56 54 58 2 109.50 520.00
54 56 57 2 109.50 450.00
54 58 59 2 109.00 1680.51
54 58 60 2 108.53 443.00
54 58 61 2 111.00 530.00
59 58 60 2 108.00 465.00
59 58 61 2 109.60 450.00
60 58 61 2 110.00 4763.46
58 61 62 2 109.60 450.00
58 61 63 2 109.00 1680.51
58 61 64 2 111.00 530.00
62 61 63 2 107.00 2726.16
62 61 64 2 109.60 450.00
63 61 64 2 110.00 4763.46
61 64 65 2 109.60 450.00
61 64 66 2 109.60 450.00
61 64 67 2 111.00 530.00
65 64 66 2 107.00 2726.16
65 64 67 2 109.50 285.00
66 64 67 2 109.60 450.00
64 67 68 2 109.60 450.00
64 67 69 2 109.50 285.00
64 67 70 2 111.00 530.00
68 67 69 2 107.00 2726.16
68 67 70 2 109.60 450.00
69 67 70 2 109.60 450.00
67 70 71 2 109.60 450.00
67 70 72 2 109.60 450.00
67 70 73 2 111.00 530.00
71 70 72 2 107.00 2726.16
71 70 73 2 109.60 450.00
72 70 73 2 109.60 450.00
70 73 74 2 109.60 450.00
70 73 75 2 109.50 285.00
70 73 76 2 111.00 530.00
74 73 75 2 107.00 2726.16
74 73 76 2 109.60 450.00
75 73 76 2 109.60 450.00
73 76 77 2 109.60 450.00
73 76 78 2 109.60 450.00
73 76 79 2 111.00 530.00
77 76 78 2 107.00 2726.16
77 76 79 2 109.50 285.00
78 76 79 2 109.50 285.00
76 79 80 2 109.50 285.00
76 79 81 2 109.50 285.00
76 79 82 2 111.00 530.00
80 79 81 2 107.00 2726.16
80 79 82 2 109.60 450.00
81 79 82 2 109.60 450.00
79 82 83 2 110.30 524.00
79 82 84 2 110.30 524.00
79 82 85 2 110.30 524.00
83 82 84 2 108.53 443.00
83 82 85 2 108.53 443.00
84 82 85 2 108.53 443.00

44 47 51 54 1 0.00 5.92 3
47 51 54 56 1 0.00 5.92 3
51 54 56 57 1 0.00 1.26 3
51 54 58 61 1 0.00 5.92 3
54 58 61 64 1 0.00 5.92 3
58 61 64 67 1 0.00 5.92 3
61 64 67 70 1 0.00 5.92 3
64 67 70 73 1 0.00 5.92 3
67 70 73 76 1 0.00 5.92 3
70 73 76 79 1 0.00 5.92 3
73 76 79 82 1 0.00 5.92 3
76 79 82 83 1 0.00 5.92 3

38 opls_140 1 c26 H32 6 0.050 1.0080
39 opls_140 1 c26 H33 6 0.050 1.0080
; 0.000
40 opls_158 1 c26 C12 7 -0.102
12.0110
41 opls_140 1 c26 H20 7 0.052 1.0080
42 opls_140 1 c26 H21 7 0.052 1.0080
43 opls_158 1 c26 C11 7 -0.102
12.0110
44 opls_140 1 c26 H18 7 0.051 1.0080
45 opls_140 1 c26 H19 7 0.051 1.0080
46 opls_158 1 c26 C10 7 -0.104
12.0110
47 opls_140 1 c26 H16 7 0.051 1.0080
48 opls_140 1 c26 H17 7 0.051 1.0080
; 0.000
49 opls_158 1 c26 C9 8 -0.102
12.0110
50 opls_140 1 c26 H14 8 0.051 1.0080
51 opls_140 1 c26 H15 8 0.051 1.0080
52 opls_158 1 c26 C8 8 -0.102
12.0110
53 opls_140 1 c26 H12 8 0.051 1.0080
54 opls_140 1 c26 H13 8 0.051 1.0080
55 opls_158 1 c26 C7 8 -0.102
12.0110
56 opls_140 1 c26 H22 8 0.051 1.0080
57 opls_140 1 c26 H23 8 0.051 1.0080
; 0.000
58 opls_158 1 c26 C14 9 -0.102
12.0110
59 opls_140 1 c26 H24 9 0.051 1.0080
60 opls_140 1 c26 H25 9 0.051 1.0080
61 opls_158 1 c26 C15 9 -0.102
12.0110
62 opls_140 1 c26 H26 9 0.051 1.0080
63 opls_140 1 c26 H27 9 0.051 1.0080
64 opls_158 1 c26 C16 9 -0.102
12.0110
65 opls_140 1 c26 H28 9 0.051 1.0080
66 opls_140 1 c26 H29 9 0.051 1.0080
; 0.000
67 opls_158 1 c26 C6 10 -0.102
12.0110
68 opls_140 1 c26 H30 10 0.051
1.0080
69 opls_140 1 c26 H31 10 0.051
1.0080
70 opls_158 1 c26 C5 10 -0.102
12.0110
71 opls_140 1 c26 H10 10 0.051
1.0080
72 opls_140 1 c26 H11 10 0.051
1.0080
73 opls_158 1 c26 C4 10 -0.102
12.0110
74 opls_140 1 c26 H8 10 0.051 1.0080
75 opls_140 1 c26 H9 10 0.051 1.0080
; 0.000
76 opls_158 1 c26 C3 11 -0.103
12.0110
77 opls_140 1 c26 H6 11 0.051 1.0080
78 opls_140 1 c26 H7 11 0.051 1.0080
79 opls_158 1 c26 C2 11 -0.097
12.0110
80 opls_140 1 c26 H4 11 0.048 1.0080
81 opls_140 1 c26 H5 11 0.048 1.0080
82 opls_157 1 c26 C1 11 -0.109
12.0110
83 opls_140 1 c26 H1 11 0.037 1.0080
84 opls_140 1 c26 H2 11 0.037 1.0080
85 opls_140 1 c26 H3 11 0.037 1.0080
; -0.000
; total charge of the molecule:
-0.000

; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.0938 2.9551e+07
2 3 2 0.1410 6.5389e+06
3 4 2 0.1110 4.8697e+06
3 5 2 0.1110 4.8697e+06
3 6 2 0.1530 7.1500e+06
6 7 2 0.1110 4.8697e+06
6 8 2 0.1110 4.8697e+06
6 9 2 0.1430 8.1800e+06
9 10 2 0.1420 3.2236e+06
10 11 2 0.1110 4.8697e+06
10 12 2 0.1110 4.8697e+06

exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

moleculetype
; Name nrexcl
c26 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_140 1 c26 H52 1 0.184 1.0080
2 opls_272 1 c26 O5 1 -0.312 15.9994
3 opls_157 1 c26 C26 1 0.064 12.0110
4 opls_140 1 c26 H53 1 0.032 1.0080
5 opls_140 1 c26 H54 1 0.032 1.0080
; 0.000
6 opls_158 1 c26 C25 2 0.051 12.0110
7 opls_140 1 c26 H50 2 0.041 1.0080
8 opls_140 1 c26 H51 2 0.041 1.0080
9 opls_272 1 c26 O4 2 -0.272 15.9994
10 opls_158 1 c26 C24 2 0.057
12.0110
11 opls_140 1 c26 H48 2 0.041 1.0080
12 opls_140 1 c26 H49 2 0.041 1.0080
; -0.000
13 opls_158 1 c26 C23 3 0.054
12.0110
14 opls_140 1 c26 H46 3 0.040 1.0080
15 opls_140 1 c26 H47 3 0.040 1.0080
16 opls_272 1 c26 O3 3 -0.270
15.9994
17 opls_158 1 c26 C22 3 0.056
12.0110
18 opls_140 1 c26 H44 3 0.040 1.0080
19 opls_140 1 c26 H45 3 0.040 1.0080
; -0.000
20 opls_158 1 c26 C21 4 0.054
12.0110
21 opls_140 1 c26 H42 4 0.041 1.0080
22 opls_140 1 c26 H43 4 0.041 1.0080
23 opls_272 1 c26 O2 4 -0.271
15.9994
24 opls_158 1 c26 C20 4 0.053
12.0110
25 opls_140 1 c26 H40 4 0.041 1.0080
26 opls_140 1 c26 H41 4 0.041 1.0080
; -0.000
27 opls_158 1 c26 C19 5 0.051
12.0110
28 opls_140 1 c26 H38 5 0.039 1.0080
29 opls_140 1 c26 H39 5 0.039 1.0080
30 opls_272 1 c26 O1 5 -0.269
15.9994
31 opls_158 1 c26 C18 5 0.080
12.0110
32 opls_140 1 c26 H36 5 0.030 1.0080
33 opls_140 1 c26 H37 5 0.030 1.0080
; -0.000
34 opls_158 1 c26 C17 6 -0.115
12.0110
35 opls_140 1 c26 H34 6 0.062 1.0080
36 opls_140 1 c26 H35 6 0.062 1.0080
37 opls_158 1 c26 C13 6 -0.109
12.0110

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 7 1 0.00 5.92 3
2 5 7 8 1 0.00 1.26 3
2 5 9 12 1 0.00 5.92 3
5 9 12 14 1 0.00 5.92 3
9 12 14 15 1 0.00 1.26 3
9 12 16 19 1 0.00 5.92 3
12 16 19 21 1 0.00 5.92 3
16 19 21 22 1 0.00 1.26 3
16 19 23 26 1 0.00 5.92 3
19 23 26 28 1 0.00 5.92 3
23 26 28 29 1 0.00 1.26 3
23 26 30 33 1 0.00 5.92 3
26 30 33 35 1 0.00 5.92 3
30 33 35 36 1 0.00 1.26 3
30 33 37 40 1 0.00 5.92 3
33 37 40 42 1 0.00 5.92 3
37 40 42 43 1 0.00 1.26 3
37 40 44 47 1 0.00 5.92 3
40 44 47 49 1 0.00 5.92 3
44 47 49 50 1 0.00 1.26 3

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.0938 2.9551e+07
2 3 2 0.1410 6.5389e+06
3 4 2 0.1110 4.8697e+06
3 5 2 0.1110 4.8697e+06
3 6 2 0.1530 7.1500e+06
6 7 2 0.1110 4.8697e+06
6 8 2 0.1110 4.8697e+06
6 9 2 0.1430 8.1800e+06
9 10 2 0.1420 3.2236e+06
10 11 2 0.1110 4.8697e+06
10 12 2 0.1110 4.8697e+06

```

## ■ Hexacosano ( $C_{26}H_{54}$ )

10 13 2 0.1530 7.1500e+06	5 8 1	42 45 1
13 14 2 0.1110 4.8697e+06	5 9 1	42 46 1
13 15 2 0.1110 4.8697e+06	6 11 1	43 50 1
13 16 2 0.1430 8.1800e+06	6 12 1	43 51 1
16 17 2 0.1420 3.2236e+06	6 13 1	43 52 1
17 18 2 0.1110 4.8697e+06	7 10 1	44 47 1
17 19 2 0.1110 4.8697e+06	8 10 1	44 48 1
17 20 2 0.1530 7.1500e+06	9 14 1	44 49 1
20 21 2 0.1110 4.8697e+06	9 15 1	45 47 1
20 22 2 0.1110 4.8697e+06	9 16 1	45 48 1
20 23 2 0.1420 3.2236e+06	10 17 1	45 49 1
23 24 2 0.1430 8.1800e+06	11 14 1	46 53 1
24 25 2 0.1110 4.8697e+06	11 15 1	46 54 1
24 26 2 0.1110 4.8697e+06	11 16 1	46 55 1
24 27 2 0.1530 7.1500e+06	12 14 1	47 50 1
27 28 2 0.1110 4.8697e+06	12 15 1	47 51 1
27 29 2 0.1110 4.8697e+06	12 16 1	47 52 1
27 30 2 0.1420 3.2236e+06	13 18 1	48 50 1
30 31 2 0.1430 8.1800e+06	13 19 1	48 51 1
31 32 2 0.1110 4.8697e+06	13 20 1	48 52 1
31 33 2 0.1110 4.8697e+06	14 17 1	49 56 1
31 34 2 0.1530 7.1500e+06	15 17 1	49 57 1
34 35 2 0.1110 4.8697e+06	16 21 1	49 58 1
34 36 2 0.1110 4.8697e+06	16 22 1	50 53 1
34 37 2 0.1520 5.4300e+06	16 23 1	50 54 1
37 38 2 0.1110 4.8697e+06	17 24 1	50 55 1
37 39 2 0.1110 4.8697e+06	18 21 1	51 53 1
37 40 2 0.1520 5.4300e+06	18 22 1	51 54 1
40 41 2 0.1110 4.8697e+06	18 23 1	51 55 1
40 42 2 0.1110 4.8697e+06	19 21 1	52 59 1
40 43 2 0.1520 5.4300e+06	19 22 1	52 60 1
43 44 2 0.1110 4.8697e+06	19 23 1	52 61 1
43 45 2 0.1110 4.8697e+06	20 25 1	53 56 1
43 46 2 0.1520 5.4300e+06	20 26 1	53 57 1
46 47 2 0.1110 4.8697e+06	20 27 1	53 58 1
46 48 2 0.1110 4.8697e+06	21 24 1	54 56 1
46 49 2 0.1520 5.4300e+06	22 24 1	54 57 1
49 50 2 0.1110 4.8697e+06	23 28 1	54 58 1
49 51 2 0.1110 4.8697e+06	23 29 1	55 62 1
49 52 2 0.1520 5.4300e+06	23 30 1	55 63 1
52 53 2 0.1110 4.8697e+06	24 31 1	55 64 1
52 54 2 0.1110 4.8697e+06	25 28 1	56 59 1
52 55 2 0.1520 5.4300e+06	25 29 1	56 60 1
55 56 2 0.1110 4.8697e+06	25 30 1	56 61 1
55 57 2 0.1110 4.8697e+06	26 28 1	57 59 1
55 58 2 0.1520 5.4300e+06	26 29 1	57 60 1
58 59 2 0.1110 4.8697e+06	26 30 1	57 61 1
58 60 2 0.1110 4.8697e+06	27 32 1	58 65 1
58 61 2 0.1520 5.4300e+06	27 33 1	58 66 1
61 62 2 0.1110 4.8697e+06	27 34 1	58 67 1
61 63 2 0.1110 4.8697e+06	28 31 1	59 62 1
61 64 2 0.1520 5.4300e+06	29 31 1	59 63 1
64 65 2 0.1110 4.8697e+06	30 35 1	59 64 1
64 66 2 0.1110 4.8697e+06	30 36 1	60 62 1
64 67 2 0.1520 5.4300e+06	30 37 1	60 63 1
67 68 2 0.1110 4.8697e+06	31 38 1	60 64 1
67 69 2 0.1110 4.8697e+06	31 39 1	61 68 1
67 70 2 0.1520 5.4300e+06	31 40 1	61 69 1
70 71 2 0.1110 4.8697e+06	32 35 1	61 70 1
70 72 2 0.1110 4.8697e+06	32 36 1	62 65 1
70 73 2 0.1520 5.4300e+06	32 37 1	62 66 1
73 74 2 0.1110 4.8697e+06	33 35 1	62 67 1
73 75 2 0.1110 4.8697e+06	33 36 1	63 65 1
73 76 2 0.1520 5.4300e+06	33 37 1	63 66 1
76 77 2 0.1110 4.8697e+06	34 41 1	63 67 1
76 78 2 0.1110 4.8697e+06	34 42 1	64 71 1
76 79 2 0.1520 5.4300e+06	34 43 1	64 72 1
79 80 2 0.1110 4.8697e+06	35 38 1	64 73 1
79 81 2 0.1110 4.8697e+06	35 39 1	65 68 1
79 82 2 0.1520 5.4300e+06	35 40 1	65 69 1
82 83 2 0.1090 1.2300e+07	36 38 1	65 70 1
82 84 2 0.1090 1.2300e+07	36 39 1	66 68 1
82 85 2 0.1090 1.2300e+07	36 40 1	66 69 1
	37 44 1	66 70 1
	37 45 1	67 74 1
	37 46 1	67 75 1
	38 41 1	67 76 1
	38 42 1	68 71 1
	38 43 1	68 72 1
	39 41 1	68 73 1
	39 42 1	69 71 1
	39 43 1	69 72 1
	40 47 1	69 73 1
	40 48 1	70 77 1
	40 49 1	70 78 1
	41 44 1	70 79 1
	41 45 1	71 74 1
	41 46 1	71 75 1
	42 44 1	71 76 1

pairs

; ai aj funct ; all 1-4 pairs but  
the ones excluded in GROMOS itp

1 4 1	39 41 1
1 5 1	39 42 1
1 6 1	39 43 1
2 7 1	40 47 1
2 8 1	40 48 1
2 9 1	40 49 1
3 10 1	41 44 1
4 7 1	41 45 1
4 8 1	41 46 1
4 9 1	42 44 1
5 7 1	

```

72 74 1
72 75 1
72 76 1
73 80 1
73 81 1
73 82 1
74 77 1
74 78 1
74 79 1
75 77 1
75 78 1
75 79 1
76 83 1
76 84 1
76 85 1
77 80 1
77 81 1
77 82 1
78 80 1
78 81 1
78 82 1
80 83 1
80 84 1
80 85 1
81 83 1
81 84 1
81 85 1

angles
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 109.50 450.00
2 3 4 2 110.30 524.00
2 3 5 2 110.30 524.00
2 3 6 2 109.50 520.00
4 3 5 2 107.57 484.00
4 3 6 2 111.00 530.00
5 3 6 2 111.00 530.00
3 6 7 2 111.40 532.00
3 6 8 2 111.40 532.00
3 6 9 2 109.50 520.00
7 6 8 2 107.57 484.00
7 6 9 2 110.30 524.00
8 6 9 2 110.30 524.00
6 9 10 2 109.50 450.00
9 10 11 2 110.30 524.00
9 10 12 2 110.30 524.00
9 10 13 2 109.50 520.00
11 10 12 2 107.57 484.00
11 10 13 2 111.40 532.00
12 10 13 2 111.40 532.00
10 13 14 2 111.40 532.00
10 13 15 2 111.40 532.00
10 13 16 2 109.50 520.00
14 13 15 2 107.57 484.00
14 13 16 2 110.30 524.00
15 13 16 2 110.30 524.00
13 16 17 2 109.50 450.00
16 17 18 2 110.30 524.00
16 17 19 2 110.30 524.00
16 17 20 2 109.50 520.00
18 17 19 2 107.57 484.00
18 17 20 2 111.40 532.00
19 17 20 2 111.40 532.00
17 20 21 2 111.40 532.00
17 20 22 2 111.40 532.00
17 20 23 2 109.50 520.00
21 20 22 2 107.57 484.00
21 20 23 2 110.30 524.00
22 20 23 2 110.30 524.00
20 23 24 2 109.50 450.00
23 24 25 2 110.30 524.00
23 24 26 2 110.30 524.00
23 24 27 2 109.50 520.00
25 24 26 2 107.57 484.00
25 24 27 2 111.40 532.00
26 24 27 2 111.40 532.00
24 27 28 2 111.40 532.00
24 27 29 2 111.40 532.00
24 27 30 2 109.50 520.00
28 27 29 2 107.57 484.00
28 27 30 2 110.30 524.00
29 27 30 2 110.30 524.00
27 30 31 2 109.50 450.00
30 31 32 2 110.00 4763.46
30 31 33 2 110.00 4763.46
30 31 34 2 109.50 520.00
32 31 33 2 107.57 484.00
32 31 34 2 111.30 632.00

33 31 34 2 111.30 632.00
31 34 35 2 110.30 524.00
31 34 36 2 110.30 524.00
31 34 37 2 111.00 530.00
35 34 36 2 106.00 1733.55
35 34 37 2 110.00 4763.46
36 34 37 2 110.00 4763.46
34 37 38 2 110.00 4763.46
34 37 39 2 110.00 4763.46
34 37 40 2 111.00 530.00
38 37 39 2 106.00 1733.55
38 37 40 2 110.00 4763.46
39 37 40 2 110.00 4763.46
37 40 41 2 110.00 4763.46
37 40 42 2 110.00 4763.46
37 40 43 2 111.00 530.00
41 40 42 2 106.00 1733.55
41 40 43 2 110.00 4763.46
42 40 43 2 110.00 4763.46
40 43 44 2 110.00 4763.46
40 43 45 2 110.00 4763.46
40 43 46 2 111.00 530.00
44 43 45 2 106.00 1733.55
44 43 46 2 110.00 4763.46
45 43 46 2 110.00 4763.46
43 46 47 2 110.00 4763.46
43 46 48 2 110.00 4763.46
43 46 49 2 111.00 530.00
47 46 48 2 106.00 1733.55
47 46 49 2 110.00 4763.46
48 46 49 2 110.00 4763.46
46 49 50 2 110.00 4763.46
46 49 51 2 110.00 4763.46
46 49 52 2 111.00 530.00
50 49 51 2 106.00 1733.55
50 49 52 2 110.00 4763.46
51 49 52 2 110.00 4763.46
49 52 53 2 110.00 4763.46
49 52 54 2 110.00 4763.46
49 52 55 2 111.00 530.00
53 52 54 2 106.00 1733.55
53 52 55 2 110.00 4763.46
54 52 55 2 110.00 4763.46
52 55 56 2 110.00 4763.46
52 55 57 2 110.00 4763.46
52 55 58 2 111.00 530.00
56 55 57 2 106.00 1733.55
56 55 58 2 110.00 4763.46
57 55 58 2 110.00 4763.46
55 58 59 2 110.00 4763.46
55 58 60 2 110.00 4763.46
55 58 61 2 111.00 530.00
59 58 60 2 106.00 1733.55
59 58 61 2 110.00 4763.46
60 58 61 2 110.00 4763.46
58 61 62 2 110.00 4763.46
58 61 63 2 110.00 4763.46
58 61 64 2 111.00 530.00
62 61 63 2 106.00 1733.55
62 61 64 2 110.00 4763.46
63 61 64 2 110.00 4763.46
61 64 65 2 110.00 4763.46
61 64 66 2 110.00 4763.46
61 64 67 2 111.00 530.00
65 64 66 2 106.00 1733.55
65 64 67 2 110.00 4763.46
66 64 67 2 110.00 4763.46
64 67 68 2 110.00 4763.46
64 67 69 2 110.00 4763.46
64 67 70 2 111.00 530.00
68 67 69 2 106.00 1733.55
68 67 70 2 110.00 4763.46
69 67 70 2 110.00 4763.46
67 70 71 2 110.00 4763.46
67 70 72 2 110.00 4763.46
67 70 73 2 111.00 530.00
71 70 72 2 106.00 1733.55
71 70 73 2 110.00 4763.46
72 70 73 2 110.00 4763.46
70 73 74 2 110.00 4763.46
70 73 75 2 110.00 4763.46
70 73 76 2 111.00 530.00
74 73 75 2 106.00 1733.55
74 73 76 2 110.00 4763.46
75 73 76 2 110.00 4763.46
73 76 77 2 110.00 4763.46
73 76 78 2 110.00 4763.46
73 76 79 2 111.00 530.00
77 76 78 2 110.00 4763.46
78 76 79 2 110.00 4763.46
76 79 80 2 110.00 4763.46
76 79 81 2 110.00 4763.46
76 79 82 2 111.00 530.00
80 79 81 2 106.00 1733.55
80 79 82 2 110.00 4763.46
81 79 82 2 110.00 4763.46
79 82 83 2 111.30 632.00
79 82 84 2 111.30 632.00
79 82 85 2 111.30 632.00
83 82 84 2 107.57 484.00
83 82 85 2 107.57 484.00
84 82 85 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
1 2 3 6 1 0.00 1.26 3
2 3 6 9 1 0.00 5.92 3
3 6 9 10 1 0.00 1.26 3
6 9 10 13 1 0.00 1.26 3
9 10 13 16 1 0.00 5.92 3
10 13 16 17 1 0.00 1.26 3
13 16 17 20 1 0.00 1.26 3
16 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 24 1 0.00 1.26 3
20 23 24 27 1 0.00 1.26 3
23 24 27 30 1 0.00 5.92 3
24 27 30 31 1 0.00 1.26 3
27 30 31 34 1 0.00 1.26 3
30 31 34 37 1 0.00 5.92 3
31 34 37 40 1 0.00 5.92 3
34 37 40 43 1 0.00 5.92 3
37 40 43 46 1 0.00 5.92 3
40 43 46 49 1 0.00 5.92 3
43 46 49 52 1 0.00 5.92 3
46 49 52 55 1 0.00 5.92 3
49 52 55 58 1 0.00 5.92 3
52 55 58 61 1 0.00 5.92 3
55 58 61 64 1 0.00 5.92 3
58 61 64 67 1 0.00 5.92 3
61 64 67 70 1 0.00 5.92 3
64 67 70 73 1 0.00 5.92 3
67 70 73 76 1 0.00 5.92 3
70 73 76 79 1 0.00 5.92 3
73 76 79 82 1 0.00 5.92 3
76 79 82 83 1 0.00 5.92 3

clussions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions
26 30 33 35 1 0.00 5.92 3
30 33 35 36 1 0.00 1.26 3
30 33 37 40 1 0.00 5.92 3
33 37 40 42 1 0.00 5.92 3
37 40 42 43 1 0.00 1.26 3
37 40 44 47 1 0.00 5.92 3
40 44 47 49 1 0.00 5.92 3
44 47 49 50 1 0.00 1.26 3
44 47 51 54 1 0.00 5.92 3
47 51 54 56 1 0.00 5.92 3
51 54 56 57 1 0.00 1.26 3
51 54 58 61 1 0.00 5.92 3
54 58 61 64 1 0.00 5.92 3
58 61 64 67 1 0.00 5.92 3
61 64 67 70 1 0.00 5.92 3
64 67 70 73 1 0.00 5.92 3
67 70 73 76 1 0.00 5.92 3
70 73 76 79 1 0.00 5.92 3
73 76 79 82 1 0.00 5.92 3
76 79 82 83 1 0.00 5.92 3

clussions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

```

■ Heptacosano ( $C_{27}H_{56}$ )

```

moleculetype
; Name nrexcl
c27 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_l40 1 c27 H37 1 0.037 1.0080
2 opls_l58 1 c27 C18 1 -0.109
12.0110
3 opls_l40 1 c27 H35 1 0.037 1.0080
4 opls_l40 1 c27 H36 1 0.037 1.0080
5 opls_l58 1 c27 C17 1 -0.098
12.0110
6 opls_l40 1 c27 H33 1 0.048 1.0080
7 opls_l40 1 c27 H34 1 0.048 1.0080
8 opls_l58 1 c27 C16 1 -0.103
12.0110
9 opls_l40 1 c27 H31 1 0.051 1.0080
10 opls_l40 1 c27 H32 1 0.051 1.0080
; -0.001
11 opls_l58 1 c27 C15 2 -0.102
12.0110
12 opls_l40 1 c27 H29 2 0.051 1.0080
13 opls_l40 1 c27 H30 2 0.051 1.0080
14 opls_l58 1 c27 C14 2 -0.102
12.0110
15 opls_l40 1 c27 H27 2 0.051 1.0080
16 opls_l40 1 c27 H28 2 0.051 1.0080
17 opls_l58 1 c27 C2 2 -0.102
12.0110
18 opls_l40 1 c27 H23 2 0.051 1.0080
19 opls_l40 1 c27 H24 2 0.051 1.0080
; 0.000
20 opls_l58 1 c27 C1 3 -0.102
12.0110
21 opls_l40 1 c27 H1 3 0.051 1.0080
22 opls_l40 1 c27 H2 3 0.051 1.0080
23 opls_l58 1 c27 C3 3 -0.102
12.0110
24 opls_l40 1 c27 H21 3 0.051 1.0080
25 opls_l40 1 c27 H22 3 0.051 1.0080
26 opls_l58 1 c27 C4 3 -0.102
12.0110
27 opls_l40 1 c27 H19 3 0.051 1.0080
28 opls_l40 1 c27 H20 3 0.051 1.0080
; 0.000
29 opls_l58 1 c27 C5 4 -0.102
12.0110
30 opls_l40 1 c27 H17 4 0.051 1.0080
31 opls_l40 1 c27 H18 4 0.051 1.0080
32 opls_l58 1 c27 C6 4 -0.102
12.0110
33 opls_l40 1 c27 H15 4 0.051 1.0080
34 opls_l40 1 c27 H16 4 0.051 1.0080
35 opls_l58 1 c27 C7 4 -0.102
12.0110
36 opls_l40 1 c27 H13 4 0.051 1.0080
37 opls_l40 1 c27 H14 4 0.051 1.0080
; 0.000
38 opls_l58 1 c27 C8 5 -0.102
12.0110
39 opls_l40 1 c27 H11 5 0.051 1.0080
40 opls_l40 1 c27 H12 5 0.051 1.0080
41 opls_l58 1 c27 C9 5 -0.100
12.0110
42 opls_l40 1 c27 H9 5 0.051 1.0080
43 opls_l40 1 c27 H10 5 0.051 1.0080
44 opls_l58 1 c27 C10 5 -0.102
12.0110
45 opls_l40 1 c27 H7 5 0.051 1.0080
46 opls_l40 1 c27 H8 5 0.051 1.0080
; 0.002
47 opls_l58 1 c27 C11 6 -0.102
12.0110
48 opls_l40 1 c27 H5 6 0.051 1.0080
49 opls_l40 1 c27 H6 6 0.051 1.0080
50 opls_l58 1 c27 C12 6 -0.102
12.0110
51 opls_l40 1 c27 H3 6 0.051 1.0080
52 opls_l40 1 c27 H4 6 0.051 1.0080
53 opls_l58 1 c27 C13 6 -0.102
12.0110
54 opls_l40 1 c27 H25 6 0.051 1.0080
55 opls_l40 1 c27 H26 6 0.051 1.0080
; 0.000

56 opls_l58 1 c27 C19 7 -0.102
12.0110
57 opls_l40 1 c27 H38 7 0.051 1.0080
58 opls_l40 1 c27 H39 7 0.051 1.0080
59 opls_l58 1 c27 C20 7 -0.102
12.0110
60 opls_l40 1 c27 H40 7 0.051 1.0080
61 opls_l40 1 c27 H41 7 0.051 1.0080
62 opls_l58 1 c27 C21 7 -0.102
12.0110
63 opls_l40 1 c27 H42 7 0.051 1.0080
64 opls_l40 1 c27 H43 7 0.051 1.0080
; 0.000
65 opls_l58 1 c27 C22 8 -0.102
12.0110
66 opls_l40 1 c27 H44 8 0.051 1.0080
67 opls_l40 1 c27 H45 8 0.051 1.0080
68 opls_l58 1 c27 C23 8 -0.102
12.0110
69 opls_l40 1 c27 H46 8 0.051 1.0080
70 opls_l40 1 c27 H47 8 0.051 1.0080
71 opls_l58 1 c27 C24 8 -0.102
12.0110
72 opls_l40 1 c27 H48 8 0.051 1.0080
73 opls_l40 1 c27 H49 8 0.051 1.0080
; 0.000
74 opls_l58 1 c27 C25 9 -0.103
12.0110
75 opls_l40 1 c27 H50 9 0.051 1.0080
76 opls_l40 1 c27 H51 9 0.051 1.0080
77 opls_l58 1 c27 C26 9 -0.098
12.0110
78 opls_l40 1 c27 H52 9 0.048 1.0080
79 opls_l40 1 c27 H53 9 0.048 1.0080
80 opls_l58 1 c27 C27 9 -0.109
12.0110
81 opls_l40 1 c27 H54 9 0.037 1.0080
82 opls_l40 1 c27 H55 9 0.037 1.0080
83 opls_l40 1 c27 H56 9 0.037 1.0080
; -0.001
; total charge of the molecule:
-0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1520 5.4300e+06
5 6 2 0.1110 4.8697e+06
5 7 2 0.1110 4.8697e+06
5 8 2 0.1520 5.4300e+06
8 9 2 0.1110 4.8697e+06
8 10 2 0.1110 4.8697e+06
8 11 2 0.1520 5.4300e+06
11 12 2 0.1110 4.8697e+06
11 13 2 0.1110 4.8697e+06
11 14 2 0.1520 5.4300e+06
14 15 2 0.1110 4.8697e+06
14 16 2 0.1110 4.8697e+06
14 17 2 0.1520 5.4300e+06
17 18 2 0.1110 4.8697e+06
17 19 2 0.1110 4.8697e+06
17 20 2 0.1520 5.4300e+06
20 21 2 0.1110 4.8697e+06
20 22 2 0.1110 4.8697e+06
20 23 2 0.1520 5.4300e+06
23 24 2 0.1110 4.8697e+06
23 25 2 0.1110 4.8697e+06
23 26 2 0.1520 5.4300e+06
26 27 2 0.1110 4.8697e+06
26 28 2 0.1110 4.8697e+06
26 29 2 0.1520 5.4300e+06
29 30 2 0.1110 4.8697e+06
29 31 2 0.1110 4.8697e+06
29 32 2 0.1520 5.4300e+06
32 33 2 0.1110 4.8697e+06
32 34 2 0.1110 4.8697e+06
32 35 2 0.1520 5.4300e+06
35 36 2 0.1110 4.8697e+06
35 37 2 0.1110 4.8697e+06
35 38 2 0.1520 5.4300e+06
38 39 2 0.1110 4.8697e+06
38 40 2 0.1110 4.8697e+06
38 41 2 0.1520 5.4300e+06
41 42 2 0.1110 4.8697e+06
41 43 2 0.1110 4.8697e+06
41 44 2 0.1520 5.4300e+06
44 45 2 0.1110 4.8697e+06

44 46 2 0.1110 4.8697e+06
44 47 2 0.1520 5.4300e+06
47 48 2 0.1110 4.8697e+06
47 49 2 0.1110 4.8697e+06
47 50 2 0.1520 5.4300e+06
50 51 2 0.1110 4.8697e+06
50 52 2 0.1110 4.8697e+06
50 53 2 0.1520 5.4300e+06
53 54 2 0.1110 4.8697e+06
53 55 2 0.1110 4.8697e+06
53 56 2 0.1520 5.4300e+06
56 57 2 0.1110 4.8697e+06
56 58 2 0.1110 4.8697e+06
56 59 2 0.1520 5.4300e+06
59 60 2 0.1110 4.8697e+06
59 61 2 0.1110 4.8697e+06
59 62 2 0.1520 5.4300e+06
62 63 2 0.1110 4.8697e+06
62 64 2 0.1110 4.8697e+06
62 65 2 0.1520 5.4300e+06
65 66 2 0.1110 4.8697e+06
65 67 2 0.1110 4.8697e+06
65 68 2 0.1520 5.4300e+06
68 69 2 0.1110 4.8697e+06
68 70 2 0.1110 4.8697e+06
68 71 2 0.1520 5.4300e+06
71 72 2 0.1110 4.8697e+06
71 73 2 0.1110 4.8697e+06
71 74 2 0.1520 5.4300e+06
74 75 2 0.1110 4.8697e+06
74 76 2 0.1110 4.8697e+06
74 77 2 0.1520 5.4300e+06
77 78 2 0.1110 4.8697e+06
77 79 2 0.1110 4.8697e+06
77 80 2 0.1520 5.4300e+06
80 81 2 0.1090 1.2300e+07
80 82 2 0.1090 1.2300e+07
80 83 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1

```

16 19 1  
16 20 1  
17 24 1  
17 25 1  
17 26 1  
18 21 1  
18 22 1  
18 23 1  
19 21 1  
19 22 1  
19 23 1  
20 27 1  
20 28 1  
20 29 1  
21 24 1  
21 25 1  
21 26 1  
22 24 1  
22 25 1  
22 26 1  
23 30 1  
23 31 1  
23 32 1  
24 27 1  
24 28 1  
24 29 1  
25 27 1  
25 28 1  
25 29 1  
26 33 1  
26 34 1  
26 35 1  
27 30 1  
27 31 1  
27 32 1  
28 30 1  
28 31 1  
28 32 1  
29 36 1  
29 37 1  
29 38 1  
30 33 1  
30 34 1  
30 35 1  
31 33 1  
31 34 1  
31 35 1  
32 39 1  
32 40 1  
32 41 1  
33 36 1  
33 37 1  
33 38 1  
34 36 1  
34 37 1  
34 38 1  
35 42 1  
35 43 1  
35 44 1  
36 39 1  
36 40 1  
36 41 1  
37 39 1  
37 40 1  
37 41 1  
38 45 1  
38 46 1  
38 47 1  
39 42 1  
39 43 1  
39 44 1  
40 42 1  
40 43 1  
40 44 1  
41 48 1  
41 49 1  
41 50 1  
42 45 1  
42 46 1  
42 47 1  
43 45 1  
43 46 1  
43 47 1  
44 51 1  
44 52 1  
44 53 1  
45 48 1  
45 49 1  
45 50 1

46 48 1  
46 49 1  
46 50 1  
47 54 1  
47 55 1  
47 56 1  
48 51 1  
48 52 1  
48 53 1  
49 51 1  
49 52 1  
49 53 1  
50 57 1  
50 58 1  
50 59 1  
51 54 1  
51 55 1  
51 56 1  
52 54 1  
52 55 1  
52 56 1  
53 60 1  
53 61 1  
53 62 1  
54 57 1  
54 58 1  
54 59 1  
55 57 1  
55 58 1  
55 59 1  
56 63 1  
56 64 1  
56 65 1  
57 60 1  
57 61 1  
57 62 1  
58 60 1  
58 61 1  
58 62 1  
59 66 1  
59 67 1  
59 68 1  
60 63 1  
60 64 1  
60 65 1  
61 63 1  
61 64 1  
61 65 1  
62 69 1  
62 69 1  
62 70 1  
62 71 1  
63 66 1  
63 67 1  
63 68 1  
64 66 1  
64 67 1  
64 68 1  
65 72 1  
65 72 1  
65 73 1  
65 74 1  
66 69 1  
66 70 1  
66 71 1  
67 69 1  
67 70 1  
67 71 1  
68 75 1  
68 76 1  
68 77 1  
69 72 1  
69 72 1  
69 73 1  
69 74 1  
70 72 1  
70 73 1  
70 74 1  
71 78 1  
71 79 1  
71 80 1  
72 75 1  
72 76 1  
72 77 1  
73 75 1  
73 76 1  
73 77 1  
74 81 1  
74 82 1  
74 83 1  
75 78 1  
75 79 1

75 80 1  
76 78 1  
76 79 1  
76 80 1  
78 81 1  
78 82 1  
78 83 1  
79 81 1  
79 82 1  
79 83 1

angles

```
; ai aj ak funct angle fc  
1 2 3 2 107.57 484.00  
1 2 4 2 107.57 484.00  
1 2 5 2 111.30 632.00  
3 2 4 2 107.57 484.00  
3 2 5 2 111.30 632.00  
4 2 5 2 111.30 632.00  
2 5 6 2 110.00 4763.46  
2 5 7 2 110.00 4763.46  
2 5 8 2 111.00 530.00  
6 5 7 2 106.00 1733.55  
6 5 8 2 110.00 4763.46  
7 5 8 2 110.00 4763.46  
5 8 9 2 110.00 4763.46  
5 8 10 2 110.00 4763.46  
5 8 11 2 111.00 530.00  
9 8 10 2 106.00 1733.55  
9 8 11 2 110.00 4763.46  
10 8 11 2 110.00 4763.46  
8 11 12 2 110.00 4763.46  
8 11 13 2 110.00 4763.46  
8 11 14 2 111.00 530.00  
12 11 13 2 106.00 1733.55  
12 11 14 2 110.00 4763.46  
13 11 14 2 110.00 4763.46  
11 14 15 2 110.00 4763.46  
11 14 16 2 110.00 4763.46  
11 14 17 2 111.00 530.00  
15 14 16 2 106.00 1733.55  
15 14 17 2 110.00 4763.46  
16 14 17 2 110.00 4763.46  
14 17 18 2 110.00 4763.46  
14 17 19 2 110.00 4763.46  
14 17 20 2 111.00 530.00  
18 17 19 2 106.00 1733.55  
18 17 20 2 110.00 4763.46  
19 17 20 2 110.00 4763.46  
17 20 21 2 110.00 4763.46  
17 20 22 2 110.00 4763.46  
17 20 23 2 111.00 530.00  
21 20 22 2 106.00 1733.55  
21 20 23 2 110.00 4763.46  
22 20 23 2 110.00 4763.46  
20 23 24 2 110.00 4763.46  
20 23 25 2 110.00 4763.46  
20 23 26 2 111.00 530.00  
24 23 25 2 106.00 1733.55  
24 23 26 2 110.00 4763.46  
25 23 26 2 110.00 4763.46  
23 26 27 2 110.00 4763.46  
23 26 28 2 110.00 4763.46  
23 26 29 2 111.00 530.00  
27 26 28 2 106.00 1733.55  
27 26 29 2 110.00 4763.46  
28 26 29 2 110.00 4763.46  
26 29 30 2 110.00 4763.46  
26 29 31 2 110.00 4763.46  
26 29 32 2 111.00 530.00  
30 29 31 2 106.00 1733.55  
30 29 32 2 110.00 4763.46  
31 29 32 2 110.00 4763.46  
29 32 33 2 110.00 4763.46  
29 32 34 2 110.00 4763.46  
29 32 35 2 111.00 530.00  
33 32 34 2 106.00 1733.55  
33 32 35 2 110.00 4763.46  
34 32 35 2 110.00 4763.46  
32 35 36 2 110.00 4763.46  
32 35 37 2 110.00 4763.46  
32 35 38 2 111.00 530.00  
36 35 37 2 106.00 1733.55  
36 35 38 2 110.00 4763.46  
37 35 38 2 110.00 4763.46  
35 38 39 2 110.00 4763.46  
35 38 40 2 110.00 4763.46  
35 38 41 2 111.00 530.00
```

```

39 38 40 2 106.00 1733.55
39 38 41 2 110.00 4763.46
40 38 41 2 110.00 4763.46
38 41 42 2 110.00 4763.46
38 41 43 2 110.00 4763.46
38 41 44 2 111.00 530.00
42 41 43 2 106.00 1733.55
42 41 44 2 110.00 4763.46
43 41 44 2 110.00 4763.46
41 44 45 2 110.00 4763.46
41 44 46 2 110.00 4763.46
41 44 47 2 111.00 530.00
45 44 46 2 106.00 1733.55
45 44 47 2 110.00 4763.46
46 44 47 2 110.00 4763.46
44 47 48 2 110.00 4763.46
44 47 49 2 110.00 4763.46
44 47 50 2 111.00 530.00
48 47 49 2 106.00 1733.55
48 47 50 2 110.00 4763.46
49 47 50 2 110.00 4763.46
47 50 51 2 110.00 4763.46
47 50 52 2 110.00 4763.46
47 50 53 2 111.00 530.00
51 50 52 2 106.00 1733.55
51 50 53 2 110.00 4763.46
52 50 53 2 110.00 4763.46
50 53 54 2 110.00 4763.46
50 53 55 2 110.00 4763.46
50 53 56 2 111.00 530.00
54 53 55 2 106.00 1733.55
54 53 56 2 110.00 4763.46
55 53 56 2 110.00 4763.46
53 56 57 2 110.00 4763.46
53 56 58 2 110.00 4763.46
53 56 59 2 111.00 530.00
57 56 58 2 106.00 1733.55
57 56 59 2 110.00 4763.46
58 56 59 2 110.00 4763.46
56 59 60 2 110.00 4763.46
56 59 61 2 110.00 4763.46
56 59 62 2 111.00 530.00
60 59 61 2 106.00 1733.55
60 59 62 2 110.00 4763.46
61 59 62 2 110.00 4763.46
59 62 63 2 110.00 4763.46
59 62 64 2 110.00 4763.46
59 62 65 2 111.00 530.00
63 62 64 2 106.00 1733.55
63 62 65 2 110.00 4763.46
64 62 65 2 110.00 4763.46
62 65 66 2 110.00 4763.46
62 65 67 2 110.00 4763.46
62 65 68 2 111.00 530.00
66 65 67 2 106.00 1733.55
66 65 68 2 110.00 4763.46
65 68 69 2 110.00 4763.46
65 68 70 2 110.00 4763.46
65 68 71 2 111.00 530.00
69 68 70 2 106.00 1733.55
69 68 71 2 110.00 4763.46
70 68 71 2 110.00 4763.46
68 71 72 2 110.00 4763.46
68 71 73 2 110.00 4763.46
68 71 74 2 111.00 530.00
72 71 73 2 106.00 1733.55
72 71 74 2 110.00 4763.46
73 71 74 2 110.00 4763.46
71 74 75 2 110.00 4763.46
71 74 76 2 110.00 4763.46
71 74 77 2 111.00 530.00
75 74 76 2 106.00 1733.55
75 74 77 2 110.00 4763.46
76 74 77 2 110.00 4763.46
74 77 78 2 110.00 4763.46
74 77 79 2 110.00 4763.46
74 77 80 2 111.00 530.00
78 77 79 2 106.00 1733.55
78 77 80 2 110.00 4763.46
79 77 80 2 110.00 4763.46
77 80 81 2 111.30 632.00
77 80 82 2 111.30 632.00
77 80 83 2 111.30 632.00
81 80 82 2 107.57 484.00
81 80 83 2 107.57 484.00
82 80 83 2 107.57 484.00

```

dihedrals

```

; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

```

dihedrals

```

; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 44 1 0.00 5.92 3
38 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 50 1 0.00 5.92 3
44 47 50 53 1 0.00 5.92 3
47 50 53 56 1 0.00 5.92 3
50 53 56 59 1 0.00 5.92 3
53 56 59 62 1 0.00 5.92 3
56 59 62 65 1 0.00 5.92 3
59 62 65 68 1 0.00 5.92 3
62 65 68 71 1 0.00 5.92 3
65 68 71 74 1 0.00 5.92 3
68 71 74 77 1 0.00 5.92 3
71 74 77 80 1 0.00 5.92 3
74 77 80 81 1 0.00 5.92 3

```

clussions

```

; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

```

```

51 54 58 61 1 0.00 5.92 3
54 58 61 64 1 0.00 5.92 3
58 61 64 67 1 0.00 5.92 3
61 64 67 70 1 0.00 5.92 3
64 67 70 73 1 0.00 5.92 3
67 70 73 76 1 0.00 5.92 3
70 73 76 79 1 0.00 5.92 3
73 76 79 82 1 0.00 5.92 3
76 79 82 83 1 0.00 5.92 3

```

clussions

```

; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

```

## ■ Ocatacosano ( $C_{28}H_{58}$ )

moleculetype

```

; Name nrexcl
c28 3

```

atoms

```

; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls.l40 1 c28 H3 1 0.037 1.0080
2 opls.l57 1 c28 C1 1 -0.108 12.0110
3 opls.l40 1 c28 H1 1 0.037 1.0080
4 opls.l40 1 c28 H2 1 0.037 1.0080
5 opls.l58 1 c28 C3 1 -0.098 12.0110
6 opls.l40 1 c28 H7 1 0.048 1.0080
7 opls.l40 1 c28 H8 1 0.048 1.0080
8 opls.l58 1 c28 C5 1 -0.103 12.0110
9 opls.l40 1 c28 H11 1 0.051 1.0080
10 opls.l40 1 c28 H12 1 0.051 1.0080
; -0.000
11 opls.l58 1 c28 C7 2 -0.102
12.0110
12 opls.l40 1 c28 H15 2 0.051 1.0080
13 opls.l40 1 c28 H16 2 0.051 1.0080
14 opls.l58 1 c28 C9 2 -0.102
12.0110
15 opls.l40 1 c28 H19 2 0.051 1.0080
16 opls.l40 1 c28 H20 2 0.051 1.0080
17 opls.l58 1 c28 C11 2 -0.102

```

12.0110

```

18 opls.l40 1 c28 H23 2 0.051 1.0080
19 opls.l40 1 c28 H24 2 0.051 1.0080
; 0.000
20 opls.l58 1 c28 C13 3 -0.102
12.0110
21 opls.l40 1 c28 H27 3 0.051 1.0080
22 opls.l40 1 c28 H28 3 0.051 1.0080
23 opls.l58 1 c28 C15 3 -0.102
12.0110
24 opls.l40 1 c28 H31 3 0.051 1.0080
25 opls.l40 1 c28 H32 3 0.051 1.0080
26 opls.l58 1 c28 C17 3 -0.102
12.0110
27 opls.l40 1 c28 H35 3 0.051 1.0080
28 opls.l40 1 c28 H36 3 0.051 1.0080
; 0.000
29 opls.l58 1 c28 C19 4 -0.102
12.0110
30 opls.l40 1 c28 H39 4 0.051 1.0080
31 opls.l40 1 c28 H40 4 0.051 1.0080
32 opls.l58 1 c28 C21 4 -0.102
12.0110
33 opls.l40 1 c28 H43 4 0.051 1.0080
34 opls.l40 1 c28 H44 4 0.051 1.0080
35 opls.l58 1 c28 C23 4 -0.102
12.0110
36 opls.l40 1 c28 H47 4 0.051 1.0080
37 opls.l40 1 c28 H48 4 0.051 1.0080
; 0.000
38 opls.l58 1 c28 C25 5 -0.102
12.0110
39 opls.l40 1 c28 H51 5 0.051 1.0080
40 opls.l40 1 c28 H52 5 0.051 1.0080
41 opls.l58 1 c28 C27 5 -0.102
12.0110
42 opls.l40 1 c28 H55 5 0.051 1.0080
43 opls.l40 1 c28 H56 5 0.051 1.0080
; 0.000
44 opls.l58 1 c28 C28 6 -0.102
12.0110
45 opls.l40 1 c28 H57 6 0.051 1.0080
46 opls.l40 1 c28 H58 6 0.051 1.0080
47 opls.l58 1 c28 C26 6 -0.102
12.0110
48 opls.l40 1 c28 H53 6 0.051 1.0080
49 opls.l40 1 c28 H54 6 0.051 1.0080
; 0.000
50 opls.l58 1 c28 C24 7 -0.102
12.0110
51 opls.l40 1 c28 H49 7 0.051 1.0080
52 opls.l40 1 c28 H50 7 0.051 1.0080
53 opls.l58 1 c28 C22 7 -0.102
12.0110
54 opls.l40 1 c28 H45 7 0.051 1.0080
55 opls.l40 1 c28 H46 7 0.051 1.0080
56 opls.l58 1 c28 C20 7 -0.102
12.0110
57 opls.l40 1 c28 H41 7 0.051 1.0080
58 opls.l40 1 c28 H42 7 0.051 1.0080
; 0.000
59 opls.l58 1 c28 C18 8 -0.102
12.0110
60 opls.l40 1 c28 H37 8 0.051 1.0080
61 opls.l40 1 c28 H38 8 0.051 1.0080
62 opls.l58 1 c28 C16 8 -0.102
12.0110
63 opls.l40 1 c28 H33 8 0.051 1.0080
64 opls.l40 1 c28 H34 8 0.051 1.0080
65 opls.l58 1 c28 C14 8 -0.102
12.0110
66 opls.l40 1 c28 H29 8 0.051 1.0080
67 opls.l40 1 c28 H30 8 0.051 1.0080
; 0.000
68 opls.l58 1 c28 C12 9 -0.102
12.0110
69 opls.l40 1 c28 H25 9 0.051 1.0080
70 opls.l40 1 c28 H26 9 0.051 1.0080
71 opls.l58 1 c28 C10 9 -0.102
12.0110
72 opls.l40 1 c28 H21 9 0.051 1.0080
73 opls.l40 1 c28 H22 9 0.051 1.0080
74 opls.l58 1 c28 C8 9 -0.102
12.0110
75 opls.l40 1 c28 H17 9 0.051 1.0080
76 opls.l40 1 c28 H18 9 0.051 1.0080
; 0.000
77 opls.l58 1 c28 C6 10 -0.103
12.0110

```

```

78 opl_s_140 1 c28 H13 10 0.051
1.0080
79 opl_s_140 1 c28 H14 10 0.051
1.0080
80 opl_s_158 1 c28 C4 10 -0.098
12.0110
81 opl_s_140 1 c28 H9 10 0.048 1.0080
82 opl_s_140 1 c28 H10 10 0.048
1.0080
83 opl_s_157 1 c28 C2 10 -0.108
12.0110
84 opl_s_140 1 c28 H4 10 0.037 1.0080
85 opl_s_140 1 c28 H5 10 0.037 1.0080
86 opl_s_140 1 c28 H6 10 0.037 1.0080
; -0.000
; total charge of the molecule:
-0.000

```

```

68 71 2 0.1520 5.4300e+06
71 72 2 0.1110 4.8697e+06
71 73 2 0.1110 4.8697e+06
71 74 2 0.1520 5.4300e+06
74 75 2 0.1110 4.8697e+06
74 76 2 0.1110 4.8697e+06
74 77 2 0.1520 5.4300e+06
77 78 2 0.1110 4.8697e+06
77 79 2 0.1110 4.8697e+06
77 80 2 0.1520 5.4300e+06
80 81 2 0.1110 4.8697e+06
80 82 2 0.1110 4.8697e+06
80 83 2 0.1520 5.4300e+06
83 84 2 0.1090 1.2300e+07
83 85 2 0.1090 1.2300e+07
83 86 2 0.1090 1.2300e+07

```

```

23 32 1
24 27 1
24 28 1
24 29 1
25 27 1
25 28 1
25 29 1
26 33 1
26 34 1
26 35 1
27 30 1
27 31 1
27 32 1
28 30 1
28 31 1
28 32 1
29 36 1
29 37 1
29 38 1
30 33 1
30 34 1
30 35 1
31 33 1
31 34 1
31 35 1
32 39 1
32 40 1
32 41 1
33 36 1
33 37 1
33 38 1
34 36 1
34 37 1
34 38 1
35 42 1
35 43 1
35 44 1
36 39 1
36 40 1
36 41 1
37 39 1
37 40 1
37 41 1
38 45 1
38 46 1
38 47 1
39 42 1
39 43 1
39 44 1
40 42 1
40 43 1
40 44 1
41 48 1
41 49 1
41 50 1
42 45 1
42 46 1
42 47 1
43 45 1
43 46 1
43 47 1
44 51 1
44 52 1
44 53 1
45 48 1
45 49 1
45 50 1
46 48 1
46 49 1
46 50 1
47 54 1
47 55 1
47 56 1
48 51 1
48 52 1
48 53 1
49 51 1
49 52 1
49 53 1
50 57 1
50 58 1
50 59 1
51 54 1
51 55 1
51 56 1
52 54 1
52 55 1
52 56 1
53 60 1

```

bonds

pairs

```

; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1520 5.4300e+06
5 6 2 0.1110 4.8697e+06
5 7 2 0.1110 4.8697e+06
5 8 2 0.1520 5.4300e+06
8 9 2 0.1110 4.8697e+06
8 10 2 0.1110 4.8697e+06
8 11 2 0.1520 5.4300e+06
11 12 2 0.1110 4.8697e+06
11 13 2 0.1110 4.8697e+06
11 14 2 0.1520 5.4300e+06
14 15 2 0.1110 4.8697e+06
14 16 2 0.1110 4.8697e+06
14 17 2 0.1520 5.4300e+06
17 18 2 0.1110 4.8697e+06
17 19 2 0.1110 4.8697e+06
17 20 2 0.1520 5.4300e+06
20 21 2 0.1110 4.8697e+06
20 22 2 0.1110 4.8697e+06
20 23 2 0.1520 5.4300e+06
23 24 2 0.1110 4.8697e+06
23 25 2 0.1110 4.8697e+06
23 26 2 0.1520 5.4300e+06
26 27 2 0.1110 4.8697e+06
26 28 2 0.1110 4.8697e+06
26 29 2 0.1520 5.4300e+06
29 30 2 0.1110 4.8697e+06
29 31 2 0.1110 4.8697e+06
29 32 2 0.1520 5.4300e+06
32 33 2 0.1110 4.8697e+06
32 34 2 0.1110 4.8697e+06
32 35 2 0.1520 5.4300e+06
35 36 2 0.1110 4.8697e+06
35 37 2 0.1110 4.8697e+06
35 38 2 0.1520 5.4300e+06
38 39 2 0.1110 4.8697e+06
38 40 2 0.1110 4.8697e+06
38 41 2 0.1520 5.4300e+06
41 42 2 0.1110 4.8697e+06
41 43 2 0.1110 4.8697e+06
41 44 2 0.1520 5.4300e+06
44 45 2 0.1110 4.8697e+06
44 46 2 0.1110 4.8697e+06
44 47 2 0.1520 5.4300e+06
47 48 2 0.1110 4.8697e+06
47 49 2 0.1110 4.8697e+06
47 50 2 0.1520 5.4300e+06
50 51 2 0.1110 4.8697e+06
50 52 2 0.1110 4.8697e+06
50 53 2 0.1520 5.4300e+06
53 54 2 0.1110 4.8697e+06
53 55 2 0.1110 4.8697e+06
53 56 2 0.1520 5.4300e+06
56 57 2 0.1110 4.8697e+06
56 58 2 0.1110 4.8697e+06
56 59 2 0.1520 5.4300e+06
59 60 2 0.1110 4.8697e+06
59 61 2 0.1110 4.8697e+06
59 62 2 0.1520 5.4300e+06
62 63 2 0.1110 4.8697e+06
62 64 2 0.1110 4.8697e+06
62 65 2 0.1520 5.4300e+06
65 66 2 0.1110 4.8697e+06
65 67 2 0.1110 4.8697e+06
65 68 2 0.1520 5.4300e+06
68 69 2 0.1110 4.8697e+06
68 70 2 0.1110 4.8697e+06

```

```

; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1
17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
20 27 1
20 28 1
20 29 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1
23 30 1
23 31 1

```

```

53 61 1 ; ai aj ak funct angle fc 45 44 47 2 110.00 4763.46
53 62 1 1 2 3 2 107.57 484.00 46 44 47 2 110.00 4763.46
54 57 1 1 2 4 2 107.57 484.00 44 47 48 2 110.00 4763.46
54 58 1 1 2 5 2 111.30 632.00 44 47 49 2 110.00 4763.46
54 59 1 3 2 4 2 107.57 484.00 44 47 50 2 111.00 530.00
55 57 1 3 2 5 2 111.30 632.00 48 47 49 2 106.00 1733.55
55 58 1 4 2 5 2 111.30 632.00 48 47 50 2 110.00 4763.46
55 59 1 2 5 6 2 110.00 4763.46 49 47 50 2 110.00 4763.46
56 63 1 2 5 7 2 110.00 4763.46 47 50 51 2 110.00 4763.46
56 64 1 2 5 8 2 111.00 530.00 47 50 52 2 110.00 4763.46
56 65 1 6 5 7 2 106.00 1733.55 47 50 53 2 111.00 530.00
57 60 1 6 5 8 2 110.00 4763.46 51 50 52 2 106.00 1733.55
57 61 1 7 5 8 2 110.00 4763.46 51 50 53 2 110.00 4763.46
57 62 1 5 8 9 2 110.00 4763.46 52 50 53 2 110.00 4763.46
58 60 1 5 8 10 2 110.00 4763.46 50 53 54 2 110.00 4763.46
58 61 1 5 8 11 2 111.00 530.00 50 53 55 2 110.00 4763.46
58 62 1 9 8 10 2 106.00 1733.55 50 53 56 2 111.00 530.00
59 66 1 9 8 11 2 110.00 4763.46 54 53 55 2 106.00 1733.55
59 67 1 10 8 11 2 110.00 4763.46 54 53 56 2 110.00 4763.46
59 68 1 8 11 12 2 110.00 4763.46 55 53 56 2 110.00 4763.46
60 63 1 8 11 13 2 110.00 4763.46 53 56 57 2 110.00 4763.46
60 64 1 8 11 14 2 111.00 530.00 53 56 58 2 110.00 4763.46
60 65 1 12 11 13 2 106.00 1733.55 53 56 59 2 111.00 530.00
61 63 1 12 11 14 2 110.00 4763.46 57 56 58 2 106.00 1733.55
61 64 1 13 11 14 2 110.00 4763.46 57 56 59 2 110.00 4763.46
61 65 1 11 14 15 2 110.00 4763.46 58 56 59 2 110.00 4763.46
62 69 1 11 14 16 2 110.00 4763.46 56 59 60 2 110.00 4763.46
62 70 1 11 14 17 2 111.00 530.00 56 59 61 2 110.00 4763.46
62 71 1 15 14 16 2 106.00 1733.55 56 59 62 2 111.00 530.00
63 66 1 15 14 17 2 110.00 4763.46 60 59 61 2 106.00 1733.55
63 67 1 16 14 17 2 110.00 4763.46 60 59 62 2 110.00 4763.46
63 68 1 14 17 18 2 110.00 4763.46 61 59 62 2 110.00 4763.46
64 66 1 14 17 19 2 110.00 4763.46 59 62 63 2 110.00 4763.46
64 67 1 14 17 20 2 111.00 530.00 59 62 64 2 110.00 4763.46
64 68 1 18 17 19 2 106.00 1733.55 59 62 65 2 111.00 530.00
65 72 1 18 17 20 2 110.00 4763.46 63 62 64 2 106.00 1733.55
65 73 1 19 17 20 2 110.00 4763.46 63 62 65 2 110.00 4763.46
65 74 1 17 20 21 2 110.00 4763.46 64 62 65 2 110.00 4763.46
66 69 1 17 20 22 2 110.00 4763.46 62 65 66 2 110.00 4763.46
66 70 1 17 20 23 2 111.00 530.00 62 65 67 2 110.00 4763.46
66 71 1 21 20 22 2 106.00 1733.55 62 65 68 2 111.00 530.00
67 69 1 21 20 23 2 110.00 4763.46 66 65 67 2 106.00 1733.55
67 70 1 22 20 23 2 110.00 4763.46 66 65 68 2 110.00 4763.46
67 71 1 20 23 24 2 110.00 4763.46 67 65 68 2 110.00 4763.46
68 75 1 20 23 25 2 110.00 4763.46 65 68 69 2 110.00 4763.46
68 76 1 20 23 26 2 111.00 530.00 65 68 70 2 110.00 4763.46
68 77 1 24 23 25 2 106.00 1733.55 65 68 71 2 111.00 530.00
69 72 1 24 23 26 2 110.00 4763.46 69 68 70 2 106.00 1733.55
69 73 1 25 23 26 2 110.00 4763.46 69 68 71 2 110.00 4763.46
69 74 1 23 26 27 2 110.00 4763.46 70 68 71 2 110.00 4763.46
70 72 1 23 26 28 2 110.00 4763.46 68 71 72 2 110.00 4763.46
70 73 1 23 26 29 2 111.00 530.00 68 71 73 2 110.00 4763.46
70 74 1 27 26 28 2 106.00 1733.55 68 71 74 2 111.00 530.00
71 78 1 27 26 29 2 110.00 4763.46 72 71 73 2 106.00 1733.55
71 79 1 28 26 29 2 110.00 4763.46 72 71 74 2 110.00 4763.46
71 80 1 26 29 30 2 110.00 4763.46 73 71 74 2 110.00 4763.46
72 75 1 26 29 31 2 110.00 4763.46 71 74 75 2 110.00 4763.46
72 76 1 26 29 32 2 111.00 530.00 71 74 76 2 110.00 4763.46
72 77 1 30 29 31 2 106.00 1733.55 71 74 77 2 111.00 530.00
73 75 1 30 29 32 2 110.00 4763.46 75 74 76 2 106.00 1733.55
73 76 1 31 29 32 2 110.00 4763.46 75 74 77 2 110.00 4763.46
73 77 1 29 32 33 2 110.00 4763.46 76 74 77 2 110.00 4763.46
74 81 1 29 32 34 2 110.00 4763.46 74 77 78 2 110.00 4763.46
74 82 1 29 32 35 2 111.00 530.00 74 77 79 2 110.00 4763.46
74 83 1 33 32 34 2 106.00 1733.55 74 77 80 2 111.00 530.00
75 78 1 33 32 35 2 110.00 4763.46 78 77 79 2 106.00 1733.55
75 79 1 34 32 35 2 110.00 4763.46 78 77 80 2 110.00 4763.46
75 80 1 32 35 36 2 110.00 4763.46 79 77 80 2 110.00 4763.46
76 78 1 32 35 37 2 110.00 4763.46 77 80 81 2 110.00 4763.46
76 79 1 32 35 38 2 111.00 530.00 77 80 82 2 110.00 4763.46
76 80 1 36 35 37 2 106.00 1733.55 77 80 83 2 111.00 530.00
77 84 1 36 35 38 2 110.00 4763.46 81 80 82 2 106.00 1733.55
77 85 1 37 35 38 2 110.00 4763.46 81 80 83 2 110.00 4763.46
77 86 1 35 38 39 2 110.00 4763.46 82 80 83 2 110.00 4763.46
78 81 1 35 38 40 2 110.00 4763.46 80 83 84 2 111.30 632.00
78 82 1 35 38 41 2 111.00 530.00 80 83 85 2 111.30 632.00
78 83 1 39 38 40 2 106.00 1733.55 80 83 86 2 111.30 632.00
79 81 1 39 38 41 2 110.00 4763.46 84 83 85 2 107.57 484.00
79 82 1 40 38 41 2 110.00 4763.46 84 83 86 2 107.57 484.00
79 83 1 38 41 42 2 110.00 4763.46 85 83 86 2 107.57 484.00
81 84 1 38 41 43 2 110.00 4763.46
81 85 1 38 41 44 2 111.00 530.00
81 86 1 42 41 43 2 106.00 1733.55
82 84 1 42 41 44 2 110.00 4763.46 ; GROMOS improper dihedrals
82 85 1 43 41 44 2 110.00 4763.46 ; ai aj ak al funct angle fc
82 86 1 41 44 45 2 110.00 4763.46
41 44 46 2 110.00 4763.46
41 44 47 2 111.00 530.00
45 44 46 2 106.00 1733.55

```

angles

dihedrals

; GROMOS improper dihedrals  
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals

; ai aj ak al funct ph0 cp mult  
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3

```

2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 44 1 0.00 5.92 3
38 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 50 1 0.00 5.92 3
44 47 50 53 1 0.00 5.92 3
47 50 53 56 1 0.00 5.92 3
50 53 56 59 1 0.00 5.92 3
53 56 59 62 1 0.00 5.92 3
56 59 62 65 1 0.00 5.92 3
59 62 65 68 1 0.00 5.92 3
62 65 68 71 1 0.00 5.92 3
65 68 71 74 1 0.00 5.92 3
68 71 74 77 1 0.00 5.92 3
71 74 77 80 1 0.00 5.92 3
74 77 80 83 1 0.00 5.92 3
77 80 83 84 1 0.00 5.92 3

clussions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

■ Nonacosano (C29H60)

moleculetype
; Name nrexcl
c29 3

atoms
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total.charge
1 opls.140 1 c29 H3 1 0.037 1.0080
2 opls.157 1 c29 C1 1 -0.109 12.0110
3 opls.140 1 c29 H1 1 0.037 1.0080
4 opls.140 1 c29 H2 1 0.037 1.0080
5 opls.158 1 c29 C2 1 -0.098 12.0110
6 opls.140 1 c29 H4 1 0.048 1.0080
7 opls.140 1 c29 H5 1 0.048 1.0080
8 opls.158 1 c29 C3 1 -0.103 12.0110
9 opls.140 1 c29 H6 1 0.051 1.0080
10 opls.140 1 c29 H7 1 0.051 1.0080
; -0.001
11 opls.158 1 c29 C4 2 -0.102
12.0110
12 opls.140 1 c29 H8 2 0.051 1.0080
13 opls.140 1 c29 H9 2 0.051 1.0080
14 opls.158 1 c29 C5 2 -0.102
12.0110
15 opls.140 1 c29 H10 2 0.051 1.0080
16 opls.140 1 c29 H11 2 0.051 1.0080
; 0.000
17 opls.158 1 c29 C6 3 -0.102
12.0110
18 opls.140 1 c29 H12 3 0.051 1.0080
19 opls.140 1 c29 H13 3 0.051 1.0080
20 opls.158 1 c29 C7 3 -0.102
12.0110
21 opls.140 1 c29 H14 3 0.051 1.0080
22 opls.140 1 c29 H15 3 0.051 1.0080
23 opls.158 1 c29 C8 3 -0.103
12.0110
24 opls.140 1 c29 H16 3 0.052 1.0080
25 opls.140 1 c29 H17 3 0.052 1.0080
; 0.001
26 opls.158 1 c29 C9 4 -0.105
12.0110
27 opls.140 1 c29 H18 4 0.053 1.0080
28 opls.140 1 c29 H19 4 0.053 1.0080
29 opls.158 1 c29 C10 4 -0.105
12.0110
30 opls.140 1 c29 H20 4 0.052 1.0080
31 opls.140 1 c29 H21 4 0.052 1.0080
32 opls.158 1 c29 C11 4 -0.107
12.0110
33 opls.140 1 c29 H22 4 0.053 1.0080
34 opls.140 1 c29 H23 4 0.053 1.0080
; -0.001
35 opls.158 1 c29 C12 5 -0.111
12.0110
36 opls.140 1 c29 H24 5 0.055 1.0080
37 opls.140 1 c29 H25 5 0.055 1.0080
38 opls.158 1 c29 C13 5 -0.102
12.0110
39 opls.140 1 c29 H26 5 0.052 1.0080
40 opls.140 1 c29 H27 5 0.052 1.0080
; 0.001
41 opls.158 1 c29 C14 6 -0.104
12.0110
42 opls.140 1 c29 H28 6 0.052 1.0080
43 opls.140 1 c29 H29 6 0.052 1.0080
44 opls.158 1 c29 C15 6 -0.110
12.0110
45 opls.140 1 c29 H30 6 0.055 1.0080
46 opls.140 1 c29 H31 6 0.055 1.0080
; 0.000
47 opls.158 1 c29 C16 7 -0.104
12.0110
48 opls.140 1 c29 H32 7 0.052 1.0080
49 opls.140 1 c29 H33 7 0.052 1.0080
; 0.000
50 opls.158 1 c29 C17 8 -0.102
12.0110
51 opls.140 1 c29 H34 8 0.052 1.0080
52 opls.140 1 c29 H35 8 0.052 1.0080
53 opls.158 1 c29 C18 8 -0.111
12.0110
54 opls.140 1 c29 H36 8 0.055 1.0080
55 opls.140 1 c29 H37 8 0.055 1.0080
56 opls.158 1 c29 C19 8 -0.107
12.0110
57 opls.140 1 c29 H38 8 0.053 1.0080
58 opls.140 1 c29 H39 8 0.053 1.0080
; 0.000
59 opls.158 1 c29 C20 9 -0.105
12.0110
60 opls.140 1 c29 H40 9 0.052 1.0080
61 opls.140 1 c29 H41 9 0.052 1.0080
62 opls.158 1 c29 C21 9 -0.105
12.0110
63 opls.140 1 c29 H42 9 0.053 1.0080
64 opls.140 1 c29 H43 9 0.053 1.0080
; 0.000
65 opls.158 1 c29 C22 10 -0.103
12.0110
66 opls.140 1 c29 H44 10 0.052
1.0080
67 opls.140 1 c29 H45 10 0.052
1.0080
68 opls.158 1 c29 C23 10 -0.102
12.0110
69 opls.140 1 c29 H46 10 0.051
1.0080
70 opls.140 1 c29 H47 10 0.051
1.0080
71 opls.158 1 c29 C24 10 -0.102
12.0110
72 opls.140 1 c29 H48 10 0.051
1.0080
73 opls.140 1 c29 H49 10 0.051
1.0080 ; 0.001
74 opls.158 1 c29 C25 11 -0.102
12.0110
75 opls.140 1 c29 H50 11 0.051
1.0080
76 opls.140 1 c29 H51 11 0.051
1.0080
77 opls.158 1 c29 C26 11 -0.102
12.0110
78 opls.140 1 c29 H52 11 0.051
1.0080
79 opls.140 1 c29 H53 11 0.051
1.0080 ; 0.000
80 opls.158 1 c29 C27 12 -0.103
12.0110
81 opls.140 1 c29 H54 12 0.051
1.0080
82 opls.140 1 c29 H55 12 0.051
1.0080
83 opls.158 1 c29 C28 12 -0.098
12.0110
84 opls.140 1 c29 H56 12 0.048
1.0080
85 opls.140 1 c29 H57 12 0.048
1.0080
86 opls.157 1 c29 C29 12 -0.109
12.0110
87 opls.140 1 c29 H58 12 0.037
1.0080
88 opls.140 1 c29 H59 12 0.037
1.0080
89 opls.140 1 c29 H60 12 0.037
1.0080 ; -0.001
; total charge of the molecule:
-0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1520 5.4300e+06
5 6 2 0.1110 4.8697e+06
5 7 2 0.1110 4.8697e+06
5 8 2 0.1520 5.4300e+06
8 9 2 0.1110 4.8697e+06
8 10 2 0.1110 4.8697e+06
8 11 2 0.1520 5.4300e+06
11 12 2 0.1110 4.8697e+06
11 13 2 0.1110 4.8697e+06
11 14 2 0.1520 5.4300e+06
14 15 2 0.1110 4.8697e+06
14 16 2 0.1110 4.8697e+06
14 17 2 0.1520 5.4300e+06
17 18 2 0.1110 4.8697e+06
17 19 2 0.1110 4.8697e+06
17 20 2 0.1520 5.4300e+06
20 21 2 0.1110 4.8697e+06
20 22 2 0.1110 4.8697e+06
20 23 2 0.1520 5.4300e+06
23 24 2 0.1110 4.8697e+06
23 25 2 0.1110 4.8697e+06
23 26 2 0.1520 5.4300e+06
26 27 2 0.1110 4.8697e+06
26 28 2 0.1110 4.8697e+06
26 29 2 0.1520 5.4300e+06
29 30 2 0.1110 4.8697e+06
29 31 2 0.1110 4.8697e+06
29 32 2 0.1520 5.4300e+06
32 33 2 0.1110 4.8697e+06
32 34 2 0.1110 4.8697e+06
32 35 2 0.1520 5.4300e+06
35 36 2 0.1110 4.8697e+06
35 37 2 0.1110 4.8697e+06
35 38 2 0.1520 5.4300e+06
38 39 2 0.1110 4.8697e+06
38 40 2 0.1110 4.8697e+06
38 41 2 0.1520 5.4300e+06
41 42 2 0.1110 4.8697e+06
41 43 2 0.1110 4.8697e+06
41 44 2 0.1520 5.4300e+06
44 45 2 0.1110 4.8697e+06
44 46 2 0.1110 4.8697e+06
44 47 2 0.1520 5.4300e+06
47 48 2 0.1110 4.8697e+06
47 49 2 0.1110 4.8697e+06
47 50 2 0.1520 5.4300e+06
50 51 2 0.1110 4.8697e+06
50 52 2 0.1110 4.8697e+06
50 53 2 0.1520 5.4300e+06
53 54 2 0.1110 4.8697e+06
53 55 2 0.1110 4.8697e+06
53 56 2 0.1520 5.4300e+06
56 57 2 0.1110 4.8697e+06
56 58 2 0.1110 4.8697e+06
56 59 2 0.1520 5.4300e+06
59 60 2 0.1110 4.8697e+06
59 61 2 0.1110 4.8697e+06
59 62 2 0.1520 5.4300e+06
62 63 2 0.1110 4.8697e+06
62 64 2 0.1110 4.8697e+06
62 65 2 0.1520 5.4300e+06
65 66 2 0.1110 4.8697e+06
65 67 2 0.1110 4.8697e+06
65 68 2 0.1520 5.4300e+06
68 69 2 0.1110 4.8697e+06
68 70 2 0.1110 4.8697e+06
68 71 2 0.1520 5.4300e+06
71 72 2 0.1110 4.8697e+06
71 73 2 0.1110 4.8697e+06

```

71 74 2 0.1520 5.4300e+06	23 32 1	53 61 1
74 75 2 0.1110 4.8697e+06	24 27 1	53 62 1
74 76 2 0.1110 4.8697e+06	24 28 1	54 57 1
74 77 2 0.1520 5.4300e+06	24 29 1	54 58 1
77 78 2 0.1110 4.8697e+06	25 27 1	54 59 1
77 79 2 0.1110 4.8697e+06	25 28 1	55 57 1
77 80 2 0.1520 5.4300e+06	25 29 1	55 58 1
80 81 2 0.1110 4.8697e+06	26 33 1	55 59 1
80 82 2 0.1110 4.8697e+06	26 34 1	56 63 1
80 83 2 0.1520 5.4300e+06	26 35 1	56 64 1
83 84 2 0.1110 4.8697e+06	27 30 1	56 65 1
83 85 2 0.1110 4.8697e+06	27 31 1	57 60 1
83 86 2 0.1520 5.4300e+06	27 32 1	57 61 1
86 87 2 0.1090 1.2300e+07	28 30 1	57 62 1
86 88 2 0.1090 1.2300e+07	28 31 1	58 60 1
86 89 2 0.1090 1.2300e+07	28 32 1	58 61 1
	29 36 1	58 62 1
	29 37 1	59 66 1
	29 38 1	59 67 1
	30 33 1	59 68 1
	30 34 1	60 63 1
	30 35 1	60 64 1
	31 33 1	60 65 1
	31 34 1	61 63 1
	31 35 1	61 64 1
	32 39 1	61 65 1
	32 40 1	62 69 1
	32 41 1	62 70 1
	33 36 1	62 71 1
	33 37 1	63 66 1
	33 38 1	63 67 1
	34 36 1	63 68 1
	34 37 1	64 66 1
	34 38 1	64 67 1
	35 42 1	64 68 1
	35 43 1	65 72 1
	35 44 1	65 73 1
	36 39 1	65 74 1
	36 40 1	66 69 1
	36 41 1	66 70 1
	37 39 1	66 71 1
	37 40 1	67 69 1
	37 41 1	67 70 1
	38 45 1	67 71 1
	38 46 1	68 75 1
	38 47 1	68 76 1
	39 42 1	68 77 1
	39 43 1	69 72 1
	39 44 1	69 73 1
	40 42 1	69 74 1
	40 43 1	70 72 1
	40 44 1	70 73 1
	41 48 1	70 74 1
	41 49 1	71 78 1
	41 50 1	71 79 1
	42 45 1	71 80 1
	42 46 1	72 75 1
	42 47 1	72 76 1
	43 45 1	72 77 1
	43 46 1	73 75 1
	43 47 1	73 76 1
	44 51 1	73 77 1
	44 52 1	74 81 1
	44 53 1	74 82 1
	45 48 1	74 83 1
	45 49 1	75 78 1
	45 50 1	75 79 1
	46 48 1	75 80 1
	46 49 1	76 78 1
	46 50 1	76 79 1
	47 54 1	76 80 1
	47 55 1	77 84 1
	47 56 1	77 85 1
	48 51 1	77 86 1
	48 52 1	78 81 1
	48 53 1	78 82 1
	49 51 1	78 83 1
	49 52 1	79 81 1
	49 53 1	79 82 1
	50 57 1	79 83 1
	50 58 1	80 87 1
	50 59 1	80 88 1
	51 54 1	80 89 1
	51 55 1	81 84 1
	51 56 1	81 85 1
	52 54 1	81 86 1
	52 55 1	82 84 1
	52 56 1	82 85 1
	53 60 1	82 86 1

pairs

```

; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1
17 25 1
17 26 1
18 21 1
18 22 1
18 23 1
19 21 1
19 22 1
19 23 1
20 27 1
20 28 1
20 29 1
21 24 1
21 25 1
21 26 1
22 24 1
22 25 1
22 26 1
23 30 1
23 31 1

```

84 87 1  
84 88 1  
84 89 1  
85 87 1  
85 88 1  
85 89 1

angles

```
; ai aj ak funct angle fc
1 2 3 2 107.57 484.00
1 2 4 2 107.57 484.00
1 2 5 2 111.30 632.00
3 2 4 2 107.57 484.00
3 2 5 2 111.30 632.00
4 2 5 2 111.30 632.00
2 5 6 2 110.00 4763.46
2 5 7 2 110.00 4763.46
2 5 8 2 111.00 530.00
6 5 7 2 106.00 1733.55
6 5 8 2 110.00 4763.46
7 5 8 2 110.00 4763.46
5 8 9 2 110.00 4763.46
5 8 10 2 110.00 4763.46
5 8 11 2 111.00 530.00
9 8 10 2 106.00 1733.55
9 8 11 2 110.00 4763.46
10 8 11 2 110.00 4763.46
8 11 12 2 110.00 4763.46
8 11 13 2 110.00 4763.46
8 11 14 2 111.00 530.00
12 11 13 2 106.00 1733.55
12 11 14 2 110.00 4763.46
13 11 14 2 110.00 4763.46
11 14 15 2 110.00 4763.46
11 14 16 2 110.00 4763.46
11 14 17 2 111.00 530.00
15 14 16 2 106.00 1733.55
15 14 17 2 110.00 4763.46
16 14 17 2 110.00 4763.46
14 17 18 2 110.00 4763.46
14 17 19 2 110.00 4763.46
14 17 20 2 111.00 530.00
18 17 19 2 106.00 1733.55
18 17 20 2 110.00 4763.46
19 17 20 2 110.00 4763.46
17 20 21 2 110.00 4763.46
17 20 22 2 110.00 4763.46
17 20 23 2 111.00 530.00
21 20 22 2 106.00 1733.55
21 20 23 2 110.00 4763.46
22 20 23 2 110.00 4763.46
20 23 24 2 110.00 4763.46
20 23 25 2 110.00 4763.46
20 23 26 2 111.00 530.00
24 23 25 2 106.00 1733.55
24 23 26 2 110.00 4763.46
25 23 26 2 110.00 4763.46
23 26 27 2 110.00 4763.46
23 26 28 2 110.00 4763.46
23 26 29 2 111.00 530.00
27 26 28 2 106.00 1733.55
27 26 29 2 110.00 4763.46
28 26 29 2 110.00 4763.46
26 29 30 2 110.00 4763.46
26 29 31 2 110.00 4763.46
26 29 32 2 111.00 530.00
30 29 31 2 106.00 1733.55
30 29 32 2 110.00 4763.46
31 29 32 2 110.00 4763.46
29 32 33 2 110.00 4763.46
29 32 34 2 110.00 4763.46
29 32 35 2 111.00 530.00
33 32 34 2 106.00 1733.55
33 32 35 2 110.00 4763.46
34 32 35 2 110.00 4763.46
32 35 36 2 110.00 4763.46
32 35 37 2 110.00 4763.46
32 35 38 2 111.00 530.00
36 35 37 2 106.00 1733.55
36 35 38 2 110.00 4763.46
37 35 38 2 110.00 4763.46
35 38 39 2 110.30 524.00
35 38 40 2 110.30 524.00
35 38 41 2 111.00 530.00
39 38 40 2 106.00 1733.55
39 38 41 2 110.30 524.00
40 38 41 2 110.30 524.00
38 41 42 2 109.50 285.00
```

```
38 41 43 2 109.50 285.00
38 41 44 2 111.00 530.00
42 41 43 2 106.00 1733.55
42 41 44 2 110.00 4763.46
43 41 44 2 110.00 4763.46
41 44 45 2 110.00 4763.46
41 44 46 2 110.00 4763.46
41 44 47 2 111.00 530.00
45 44 46 2 106.00 1733.55
45 44 47 2 110.00 4763.46
46 44 47 2 110.00 4763.46
44 47 48 2 110.00 4763.46
44 47 49 2 110.00 4763.46
44 47 50 2 111.00 530.00
48 47 49 2 106.00 1733.55
48 47 50 2 109.50 285.00
49 47 50 2 109.50 285.00
47 50 51 2 110.30 524.00
47 50 52 2 110.30 524.00
47 50 53 2 111.00 530.00
51 50 52 2 106.00 1733.55
51 50 53 2 110.30 524.00
52 50 53 2 110.30 524.00
50 53 54 2 110.00 4763.46
50 53 55 2 110.00 4763.46
50 53 56 2 111.00 530.00
54 53 55 2 106.00 1733.55
54 53 56 2 110.00 4763.46
55 53 56 2 110.00 4763.46
53 56 57 2 110.00 4763.46
53 56 58 2 110.00 4763.46
53 56 59 2 111.00 530.00
57 56 58 2 106.00 1733.55
57 56 59 2 110.00 4763.46
58 56 59 2 110.00 4763.46
56 59 60 2 110.00 4763.46
56 59 61 2 110.00 4763.46
56 59 62 2 111.00 530.00
60 59 61 2 106.00 1733.55
60 59 62 2 110.00 4763.46
61 59 62 2 110.00 4763.46
59 62 63 2 110.00 4763.46
59 62 64 2 110.00 4763.46
59 62 65 2 111.00 530.00
63 62 64 2 106.00 1733.55
63 62 65 2 110.00 4763.46
64 62 65 2 110.00 4763.46
62 65 66 2 110.00 4763.46
62 65 67 2 110.00 4763.46
62 65 68 2 111.00 530.00
66 65 67 2 106.00 1733.55
66 65 68 2 110.00 4763.46
67 65 68 2 110.00 4763.46
65 68 69 2 110.00 4763.46
65 68 70 2 110.00 4763.46
65 68 71 2 111.00 530.00
69 68 70 2 106.00 1733.55
69 68 71 2 110.00 4763.46
70 68 71 2 110.00 4763.46
68 71 72 2 110.00 4763.46
68 71 73 2 110.00 4763.46
68 71 74 2 111.00 530.00
72 71 73 2 106.00 1733.55
72 71 74 2 110.00 4763.46
73 71 74 2 110.00 4763.46
71 74 75 2 110.00 4763.46
71 74 76 2 110.00 4763.46
71 74 77 2 111.00 530.00
75 74 76 2 106.00 1733.55
75 74 77 2 110.00 4763.46
76 74 77 2 110.00 4763.46
74 77 78 2 110.00 4763.46
74 77 79 2 110.00 4763.46
74 77 80 2 111.00 530.00
78 77 79 2 106.00 1733.55
78 77 80 2 110.00 4763.46
79 77 80 2 110.00 4763.46
77 80 81 2 110.00 4763.46
77 80 82 2 110.00 4763.46
77 80 83 2 111.00 530.00
81 80 82 2 106.00 1733.55
81 80 83 2 110.00 4763.46
82 80 83 2 110.00 4763.46
80 83 84 2 110.00 4763.46
80 83 85 2 110.00 4763.46
80 83 86 2 111.00 530.00
84 83 85 2 106.00 1733.55
84 83 86 2 110.00 4763.46
85 83 86 2 110.00 4763.46
```

83 86 87 2 111.30 632.00  
83 86 88 2 111.30 632.00  
83 86 89 2 111.30 632.00  
87 86 88 2 107.57 484.00  
87 86 89 2 107.57 484.00  
88 86 89 2 107.57 484.00

dihedrals

```
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc
```

dihedrals

```
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 44 1 0.00 5.92 3
38 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 50 1 0.00 5.92 3
44 47 50 53 1 0.00 5.92 3
47 50 53 56 1 0.00 5.92 3
50 53 56 59 1 0.00 5.92 3
53 56 59 62 1 0.00 5.92 3
56 59 62 65 1 0.00 5.92 3
59 62 65 68 1 0.00 5.92 3
62 65 68 71 1 0.00 5.92 3
65 68 71 74 1 0.00 5.92 3
68 71 74 77 1 0.00 5.92 3
71 74 77 80 1 0.00 5.92 3
74 77 80 83 1 0.00 5.92 3
77 80 83 86 1 0.00 5.92 3
80 83 86 87 1 0.00 5.92 3
```

clussions

```
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions
```

## ■ Triacotano ( $C_{30}H_{62}$ )

moleculetype

```
; Name nrexcl
c30 3
```

atoms

```
; nr type resnr resid atom cgnr
charge mass total_charge
1 opls_140 1 c30 H3 1 0.037 1.0080
2 opls_157 1 c30 C1 1 -0.108 12.0110
3 opls_140 1 c30 H1 1 0.037 1.0080
4 opls_140 1 c30 H2 1 0.037 1.0080
5 opls_158 1 c30 C2 1 -0.098 12.0110
6 opls_140 1 c30 H4 1 0.048 1.0080
7 opls_140 1 c30 H5 1 0.048 1.0080
8 opls_158 1 c30 C3 1 -0.103 12.0110
9 opls_140 1 c30 H6 1 0.051 1.0080
10 opls_140 1 c30 H7 1 0.051 1.0080
; -0.000
11 opls_158 1 c30 C4 2 -0.102
12.0110
12 opls_140 1 c30 H8 2 0.051 1.0080
13 opls_140 1 c30 H9 2 0.051 1.0080
14 opls_158 1 c30 C5 2 -0.102
12.0110
15 opls_140 1 c30 H10 2 0.051 1.0080
16 opls_140 1 c30 H11 2 0.051 1.0080
17 opls_158 1 c30 C6 2 -0.102
12.0110
18 opls_140 1 c30 H12 2 0.051 1.0080
19 opls_140 1 c30 H13 2 0.051 1.0080
; 0.000
```

```

20 oplsl158 1 c30 C7 3 -0.102
12.0110
21 oplsl140 1 c30 H14 3 0.051 1.0080
22 oplsl140 1 c30 H15 3 0.051 1.0080
23 oplsl158 1 c30 C8 3 -0.101
12.0110
24 oplsl140 1 c30 H16 3 0.051 1.0080
25 oplsl140 1 c30 H17 3 0.051 1.0080
26 oplsl158 1 c30 C9 3 -0.109
12.0110
27 oplsl140 1 c30 H18 3 0.054 1.0080
28 oplsl140 1 c30 H19 3 0.054 1.0080
; -0.000
29 oplsl158 1 c30 C10 4 -0.098
12.0110
30 oplsl140 1 c30 H20 4 0.050 1.0080
31 oplsl140 1 c30 H21 4 0.050 1.0080
32 oplsl158 1 c30 C11 4 -0.111
12.0110
33 oplsl140 1 c30 H22 4 0.055 1.0080
34 oplsl140 1 c30 H23 4 0.055 1.0080
35 oplsl158 1 c30 C12 4 -0.106
12.0110
36 oplsl140 1 c30 H24 4 0.053 1.0080
37 oplsl140 1 c30 H25 4 0.053 1.0080
; 0.001
38 oplsl158 1 c30 C13 5 -0.103
12.0110
39 oplsl140 1 c30 H26 5 0.052 1.0080
40 oplsl140 1 c30 H27 5 0.052 1.0080
41 oplsl158 1 c30 C14 5 -0.112
12.0110
42 oplsl140 1 c30 H28 5 0.055 1.0080
43 oplsl140 1 c30 H29 5 0.055 1.0080
; -0.001
44 oplsl158 1 c30 C15 6 -0.104
12.0110
45 oplsl140 1 c30 H30 6 0.052 1.0080
46 oplsl140 1 c30 H31 6 0.052 1.0080
47 oplsl158 1 c30 C16 6 -0.104
12.0110
48 oplsl140 1 c30 H32 6 0.052 1.0080
49 oplsl140 1 c30 H33 6 0.052 1.0080
; 0.000
50 oplsl158 1 c30 C17 7 -0.112
12.0110
51 oplsl140 1 c30 H34 7 0.055 1.0080
52 oplsl140 1 c30 H35 7 0.055 1.0080
53 oplsl158 1 c30 C18 7 -0.103
12.0110
54 oplsl140 1 c30 H36 7 0.052 1.0080
55 oplsl140 1 c30 H37 7 0.052 1.0080
56 oplsl158 1 c30 C19 7 -0.106
12.0110
57 oplsl140 1 c30 H38 7 0.053 1.0080
58 oplsl140 1 c30 H39 7 0.053 1.0080
; -0.001
59 oplsl158 1 c30 C20 8 -0.111
12.0110
60 oplsl140 1 c30 H40 8 0.055 1.0080
61 oplsl140 1 c30 H41 8 0.055 1.0080
62 oplsl158 1 c30 C21 8 -0.098
12.0110
63 oplsl140 1 c30 H42 8 0.050 1.0080
64 oplsl140 1 c30 H43 8 0.050 1.0080
; 0.001
65 oplsl158 1 c30 C22 9 -0.109
12.0110
66 oplsl140 1 c30 H44 9 0.054 1.0080
67 oplsl140 1 c30 H45 9 0.054 1.0080
68 oplsl158 1 c30 C23 9 -0.101
12.0110
69 oplsl140 1 c30 H46 9 0.051 1.0080
70 oplsl140 1 c30 H47 9 0.051 1.0080
71 oplsl158 1 c30 C24 9 -0.102
12.0110
72 oplsl140 1 c30 H48 9 0.051 1.0080
73 oplsl140 1 c30 H49 9 0.051 1.0080
; -0.000
74 oplsl158 1 c30 C25 10 -0.102
12.0110
75 oplsl140 1 c30 H50 10 0.051
1.0080
76 oplsl140 1 c30 H51 10 0.051
1.0080
77 oplsl158 1 c30 C26 10 -0.102
12.0110
78 oplsl140 1 c30 H52 10 0.051
1.0080
79 oplsl140 1 c30 H53 10 0.051
1.0080
80 oplsl158 1 c30 C27 10 -0.102
12.0110
81 oplsl140 1 c30 H54 10 0.051
1.0080
82 oplsl140 1 c30 H55 10 0.051
1.0080 ; 0.000
83 oplsl158 1 c30 C28 11 -0.103
12.0110
84 oplsl140 1 c30 H56 11 0.051
1.0080
85 oplsl140 1 c30 H57 11 0.051
1.0080
86 oplsl158 1 c30 C29 11 -0.098
12.0110
87 oplsl140 1 c30 H58 11 0.048
1.0080
88 oplsl140 1 c30 H59 11 0.048
1.0080
89 oplsl157 1 c30 C30 11 -0.108
12.0110
90 oplsl140 1 c30 H60 11 0.037
1.0080
91 oplsl140 1 c30 H61 11 0.037
1.0080
92 oplsl140 1 c30 H62 11 0.037
1.0080 ; -0.000
; total charge of the molecule:
-0.000

bonds
; ai aj funct c0 c1
1 2 2 0.1090 1.2300e+07
2 3 2 0.1090 1.2300e+07
2 4 2 0.1090 1.2300e+07
2 5 2 0.1520 5.4300e+06
5 6 2 0.1110 4.8697e+06
5 7 2 0.1110 4.8697e+06
5 8 2 0.1520 5.4300e+06
8 9 2 0.1110 4.8697e+06
8 10 2 0.1110 4.8697e+06
8 11 2 0.1520 5.4300e+06
11 12 2 0.1110 4.8697e+06
11 13 2 0.1110 4.8697e+06
11 14 2 0.1520 5.4300e+06
14 15 2 0.1110 4.8697e+06
14 16 2 0.1110 4.8697e+06
14 17 2 0.1520 5.4300e+06
17 18 2 0.1110 4.8697e+06
17 19 2 0.1110 4.8697e+06
17 20 2 0.1520 5.4300e+06
20 21 2 0.1110 4.8697e+06
20 22 2 0.1110 4.8697e+06
20 23 2 0.1520 5.4300e+06
23 24 2 0.1110 4.8697e+06
23 25 2 0.1110 4.8697e+06
23 26 2 0.1520 5.4300e+06
26 27 2 0.1110 4.8697e+06
26 28 2 0.1110 4.8697e+06
26 29 2 0.1520 5.4300e+06
29 30 2 0.1110 4.8697e+06
29 31 2 0.1110 4.8697e+06
29 32 2 0.1520 5.4300e+06
32 33 2 0.1110 4.8697e+06
32 34 2 0.1110 4.8697e+06
32 35 2 0.1520 5.4300e+06
35 36 2 0.1110 4.8697e+06
35 37 2 0.1110 4.8697e+06
35 38 2 0.1520 5.4300e+06
38 39 2 0.1110 4.8697e+06
38 40 2 0.1110 4.8697e+06
38 41 2 0.1520 5.4300e+06
41 42 2 0.1110 4.8697e+06
41 43 2 0.1110 4.8697e+06
41 44 2 0.1520 5.4300e+06
44 45 2 0.1110 4.8697e+06
44 46 2 0.1110 4.8697e+06
44 47 2 0.1520 5.4300e+06
47 48 2 0.1110 4.8697e+06
47 49 2 0.1110 4.8697e+06
47 50 2 0.1520 5.4300e+06
50 51 2 0.1110 4.8697e+06
50 52 2 0.1110 4.8697e+06
50 53 2 0.1520 5.4300e+06
53 54 2 0.1110 4.8697e+06
53 55 2 0.1110 4.8697e+06
53 56 2 0.1520 5.4300e+06
56 57 2 0.1110 4.8697e+06

56 58 2 0.1110 4.8697e+06
56 59 2 0.1520 5.4300e+06
59 60 2 0.1110 4.8697e+06
59 61 2 0.1110 4.8697e+06
59 62 2 0.1520 5.4300e+06
62 63 2 0.1110 4.8697e+06
62 64 2 0.1110 4.8697e+06
62 65 2 0.1520 5.4300e+06
65 66 2 0.1110 4.8697e+06
65 67 2 0.1110 4.8697e+06
65 68 2 0.1520 5.4300e+06
68 69 2 0.1110 4.8697e+06
68 70 2 0.1110 4.8697e+06
68 71 2 0.1520 5.4300e+06
71 72 2 0.1110 4.8697e+06
71 73 2 0.1110 4.8697e+06
71 74 2 0.1520 5.4300e+06
74 75 2 0.1110 4.8697e+06
74 76 2 0.1110 4.8697e+06
74 77 2 0.1520 5.4300e+06
77 78 2 0.1110 4.8697e+06
77 79 2 0.1110 4.8697e+06
77 80 2 0.1520 5.4300e+06
80 81 2 0.1110 4.8697e+06
80 82 2 0.1110 4.8697e+06
80 83 2 0.1520 5.4300e+06
83 84 2 0.1110 4.8697e+06
83 85 2 0.1110 4.8697e+06
83 86 2 0.1520 5.4300e+06
86 87 2 0.1110 4.8697e+06
86 88 2 0.1110 4.8697e+06
86 89 2 0.1520 5.4300e+06
89 90 2 0.1090 1.2300e+07
89 91 2 0.1090 1.2300e+07
89 92 2 0.1090 1.2300e+07

pairs
; ai aj funct ; all 1-4 pairs but
the ones excluded in GROMOS itp
1 6 1
1 7 1
1 8 1
2 9 1
2 10 1
2 11 1
3 6 1
3 7 1
3 8 1
4 6 1
4 7 1
4 8 1
5 12 1
5 13 1
5 14 1
6 9 1
6 10 1
6 11 1
7 9 1
7 10 1
7 11 1
8 15 1
8 16 1
8 17 1
9 12 1
9 13 1
9 14 1
10 12 1
10 13 1
10 14 1
11 18 1
11 19 1
11 20 1
12 15 1
12 16 1
12 17 1
13 15 1
13 16 1
13 17 1
14 21 1
14 22 1
14 23 1
15 18 1
15 19 1
15 20 1
16 18 1
16 19 1
16 20 1
17 24 1

```

17 25 1  
17 26 1  
18 21 1  
18 22 1  
18 23 1  
19 21 1  
19 22 1  
19 23 1  
20 27 1  
20 28 1  
20 29 1  
21 24 1  
21 25 1  
21 26 1  
22 24 1  
22 25 1  
22 26 1  
23 30 1  
23 31 1  
23 32 1  
24 27 1  
24 28 1  
24 29 1  
25 27 1  
25 28 1  
25 29 1  
26 33 1  
26 34 1  
26 35 1  
27 30 1  
27 31 1  
27 32 1  
28 30 1  
28 31 1  
28 32 1  
29 36 1  
29 37 1  
29 38 1  
30 33 1  
30 34 1  
30 35 1  
31 33 1  
31 34 1  
31 35 1  
32 39 1  
32 40 1  
32 41 1  
33 36 1  
33 37 1  
33 38 1  
34 36 1  
34 37 1  
34 38 1  
35 42 1  
35 43 1  
35 44 1  
36 39 1  
36 40 1  
36 41 1  
37 39 1  
37 40 1  
37 41 1  
38 45 1  
38 46 1  
38 47 1  
39 42 1  
39 43 1  
39 44 1  
40 42 1  
40 43 1  
40 44 1  
41 48 1  
41 49 1  
41 50 1  
42 45 1  
42 46 1  
42 47 1  
43 45 1  
43 46 1  
43 47 1  
44 51 1  
44 52 1  
44 53 1  
45 48 1  
45 49 1  
45 50 1  
46 48 1  
46 49 1  
46 50 1

47 54 1  
47 55 1  
47 56 1  
48 51 1  
48 52 1  
48 53 1  
49 51 1  
49 52 1  
49 53 1  
50 57 1  
50 58 1  
50 59 1  
51 54 1  
51 55 1  
51 56 1  
52 54 1  
52 55 1  
52 56 1  
53 60 1  
53 61 1  
53 62 1  
54 57 1  
54 58 1  
54 59 1  
55 57 1  
55 58 1  
55 59 1  
56 63 1  
56 64 1  
56 65 1  
57 60 1  
57 61 1  
57 62 1  
58 60 1  
58 61 1  
58 62 1  
59 66 1  
59 67 1  
59 68 1  
60 63 1  
60 64 1  
60 65 1  
61 63 1  
61 64 1  
61 65 1  
62 69 1  
62 70 1  
62 71 1  
63 66 1  
63 67 1  
63 68 1  
64 66 1  
64 67 1  
64 68 1  
65 72 1  
65 73 1  
65 74 1  
66 69 1  
66 70 1  
66 71 1  
67 69 1  
67 70 1  
67 71 1  
68 75 1  
68 76 1  
68 77 1  
69 72 1  
69 73 1  
69 74 1  
70 72 1  
70 73 1  
70 74 1  
71 78 1  
71 79 1  
71 80 1  
72 75 1  
72 76 1  
72 77 1  
73 75 1  
73 76 1  
73 77 1  
74 81 1  
74 82 1  
74 83 1  
75 78 1  
75 79 1  
75 80 1  
76 78 1  
76 79 1

76 80 1  
77 84 1  
77 85 1  
77 86 1  
78 81 1  
78 82 1  
78 83 1  
79 81 1  
79 82 1  
79 83 1  
80 87 1  
80 88 1  
80 89 1  
81 84 1  
81 85 1  
81 86 1  
82 84 1  
82 85 1  
82 86 1  
83 90 1  
83 91 1  
83 92 1  
84 87 1  
84 88 1  
84 89 1  
85 87 1  
85 88 1  
85 89 1  
87 90 1  
87 91 1  
87 92 1  
88 90 1  
88 91 1  
88 92 1

angles

```
; ai aj ak funct angle fc  
1 2 3 2 107.57 484.00  
1 2 4 2 107.57 484.00  
1 2 5 2 111.30 632.00  
3 2 4 2 107.57 484.00  
3 2 5 2 111.30 632.00  
4 2 5 2 111.30 632.00  
2 5 6 2 110.00 4763.46  
2 5 7 2 110.00 4763.46  
2 5 8 2 111.00 530.00  
6 5 7 2 106.00 1733.55  
6 5 8 2 110.00 4763.46  
7 5 8 2 110.00 4763.46  
5 8 9 2 110.00 4763.46  
5 8 10 2 110.00 4763.46  
5 8 11 2 111.00 530.00  
9 8 10 2 106.00 1733.55  
9 8 11 2 110.00 4763.46  
10 8 11 2 110.00 4763.46  
8 11 12 2 110.00 4763.46  
8 11 13 2 110.00 4763.46  
8 11 14 2 111.00 530.00  
12 11 13 2 106.00 1733.55  
12 11 14 2 110.00 4763.46  
13 11 14 2 110.00 4763.46  
11 14 15 2 110.00 4763.46  
11 14 16 2 110.00 4763.46  
11 14 17 2 111.00 530.00  
15 14 16 2 106.00 1733.55  
15 14 17 2 110.00 4763.46  
16 14 17 2 110.00 4763.46  
14 17 18 2 110.00 4763.46  
14 17 19 2 110.00 4763.46  
14 17 20 2 111.00 530.00  
18 17 19 2 106.00 1733.55  
18 17 20 2 110.00 4763.46  
19 17 20 2 110.00 4763.46  
17 20 21 2 110.00 4763.46  
17 20 22 2 110.00 4763.46  
17 20 23 2 111.00 530.00  
21 20 22 2 106.00 1733.55  
21 20 23 2 110.00 4763.46  
22 20 23 2 110.00 4763.46  
20 23 24 2 110.00 4763.46  
20 23 25 2 110.00 4763.46  
20 23 26 2 111.00 530.00  
24 23 25 2 106.00 1733.55  
24 23 26 2 110.00 4763.46  
25 23 26 2 110.00 4763.46  
23 26 27 2 110.00 4763.46  
23 26 28 2 110.00 4763.46  
23 26 29 2 111.00 530.00
```

```

27 26 28 2 106.00 1733.55
27 26 29 2 110.00 4763.46
28 26 29 2 110.00 4763.46
26 29 30 2 110.00 4763.46
26 29 31 2 110.00 4763.46
26 29 32 2 111.00 530.00
30 29 31 2 106.00 1733.55
30 29 32 2 110.00 4763.46
31 29 32 2 110.00 4763.46
29 32 33 2 110.00 4763.46
29 32 34 2 110.00 4763.46
29 32 35 2 111.00 530.00
33 32 34 2 106.00 1733.55
33 32 35 2 110.00 4763.46
34 32 35 2 110.00 4763.46
32 35 36 2 110.00 4763.46
32 35 37 2 110.00 4763.46
32 35 38 2 111.00 530.00
36 35 37 2 106.00 1733.55
36 35 38 2 106.00 450.00
37 35 38 2 109.60 450.00
35 38 39 2 110.00 4763.46
35 38 40 2 110.00 4763.46
35 38 41 2 111.00 530.00
39 38 40 2 106.00 1733.55
39 38 41 2 109.60 450.00
40 38 41 2 109.60 450.00
38 41 42 2 108.00 465.00
38 41 43 2 108.00 465.00
38 41 44 2 111.00 530.00
42 41 43 2 106.00 1733.55
42 41 44 2 110.00 4763.46
43 41 44 2 110.00 4763.46
41 44 45 2 110.30 524.00
41 44 46 2 110.30 524.00
41 44 47 2 111.00 530.00
45 44 46 2 106.00 1733.55
45 44 47 2 110.00 4763.46
46 44 47 2 110.00 4763.46
44 47 48 2 110.00 4763.46
44 47 49 2 110.00 4763.46
44 47 50 2 111.00 530.00
48 47 49 2 106.00 1733.55
48 47 50 2 110.30 524.00
49 47 50 2 110.30 524.00
47 50 51 2 110.00 4763.46
47 50 52 2 110.00 4763.46
47 50 53 2 111.00 530.00
51 50 52 2 106.00 1733.55
51 50 53 2 108.00 465.00
52 50 53 2 108.00 465.00
50 53 54 2 109.60 450.00
50 53 55 2 109.60 450.00
50 53 56 2 111.00 530.00
54 53 55 2 106.00 1733.55
54 53 56 2 110.00 4763.46
55 53 56 2 110.00 4763.46

53 56 57 2 109.60 450.00
53 56 58 2 109.60 450.00
53 56 59 2 111.00 530.00
57 56 58 2 106.00 1733.55
57 56 59 2 110.00 4763.46
58 56 59 2 110.00 4763.46
56 59 60 2 110.00 4763.46
56 59 61 2 110.00 4763.46
56 59 62 2 111.00 530.00
60 59 61 2 106.00 1733.55
60 59 62 2 110.00 4763.46
61 59 62 2 110.00 4763.46
59 62 63 2 110.00 4763.46
59 62 64 2 110.00 4763.46
59 62 65 2 111.00 530.00
63 62 64 2 106.00 1733.55
63 62 65 2 110.00 4763.46
64 62 65 2 110.00 4763.46
62 65 66 2 110.00 4763.46
62 65 67 2 110.00 4763.46
62 65 68 2 111.00 530.00
66 65 67 2 106.00 1733.55
66 65 68 2 110.00 4763.46
67 65 68 2 110.00 4763.46
65 68 69 2 110.00 4763.46
65 68 70 2 110.00 4763.46
65 68 71 2 111.00 530.00
69 68 70 2 106.00 1733.55
69 68 71 2 110.00 4763.46
70 68 71 2 110.00 4763.46
68 71 72 2 110.00 4763.46
68 71 73 2 110.00 4763.46
68 71 74 2 111.00 530.00
72 71 73 2 106.00 1733.55
72 71 74 2 110.00 4763.46
73 71 74 2 110.00 4763.46
71 74 75 2 110.00 4763.46
71 74 76 2 110.00 4763.46
71 74 77 2 111.00 530.00
75 74 76 2 106.00 1733.55
75 74 77 2 110.00 4763.46
76 74 77 2 110.00 4763.46
74 77 78 2 110.00 4763.46
74 77 79 2 110.00 4763.46
74 77 80 2 111.00 530.00
78 77 79 2 106.00 1733.55
78 77 80 2 110.00 4763.46
79 77 80 2 110.00 4763.46
77 80 81 2 110.00 4763.46
77 80 82 2 110.00 4763.46
77 80 83 2 111.00 530.00
81 80 82 2 106.00 1733.55
81 80 83 2 110.00 4763.46
82 80 83 2 110.00 4763.46
80 83 84 2 110.00 4763.46
80 83 85 2 110.00 4763.46
80 83 86 2 111.00 530.00

84 83 85 2 106.00 1733.55
84 83 86 2 110.00 4763.46
85 83 86 2 110.00 4763.46
83 86 87 2 110.00 4763.46
83 86 88 2 110.00 4763.46
83 86 89 2 111.00 530.00
87 86 88 2 106.00 1733.55
87 86 89 2 110.00 4763.46
88 86 89 2 110.00 4763.46
86 89 90 2 111.30 632.00
86 89 91 2 111.30 632.00
86 89 92 2 111.30 632.00
90 89 91 2 107.57 484.00
90 89 92 2 107.57 484.00
91 89 92 2 107.57 484.00

dihedrals
; GROMOS improper dihedrals
; ai aj ak al funct angle fc

dihedrals
; ai aj ak al funct ph0 cp mult
3 2 5 8 1 0.00 5.92 3
2 5 8 11 1 0.00 5.92 3
5 8 11 14 1 0.00 5.92 3
8 11 14 17 1 0.00 5.92 3
11 14 17 20 1 0.00 5.92 3
14 17 20 23 1 0.00 5.92 3
17 20 23 26 1 0.00 5.92 3
20 23 26 29 1 0.00 5.92 3
23 26 29 32 1 0.00 5.92 3
26 29 32 35 1 0.00 5.92 3
29 32 35 38 1 0.00 5.92 3
32 35 38 41 1 0.00 5.92 3
35 38 41 44 1 0.00 5.92 3
38 41 44 47 1 0.00 5.92 3
41 44 47 50 1 0.00 5.92 3
44 47 50 53 1 0.00 5.92 3
47 50 53 56 1 0.00 5.92 3
50 53 56 59 1 0.00 5.92 3
53 56 59 62 1 0.00 5.92 3
56 59 62 65 1 0.00 5.92 3
59 62 65 68 1 0.00 5.92 3
62 65 68 71 1 0.00 5.92 3
65 68 71 74 1 0.00 5.92 3
68 71 74 77 1 0.00 5.92 3
71 74 77 80 1 0.00 5.92 3
74 77 80 83 1 0.00 5.92 3
77 80 83 86 1 0.00 5.92 3
80 83 86 89 1 0.00 5.92 3
83 86 89 90 1 0.00 5.92 3

exclusions
; ai aj funct ; GROMOS 1-4
exclusions

```

# Apéndice B

## Función de distribución radial ( $g(r)$ ).

Función de distribución radial ( $g(r)$ ) correspondientes al sistema de gas comprimido.

### B.1. Gas comprimido sin agua (sistema base).

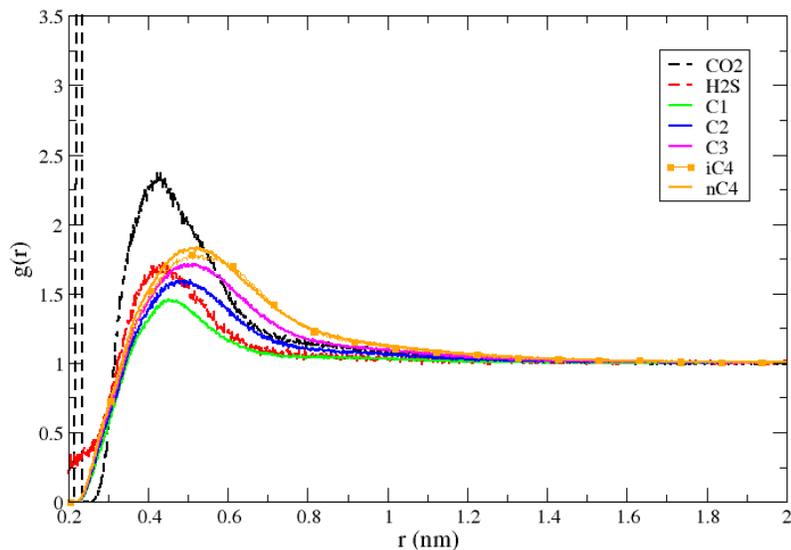


Figura B.1: Función de distribución radial contra la distancia  $r$ (nm) tomando de referencia al  $CO_2$ . A 0% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $CO_2$ , línea punteada roja es  $H_2S$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

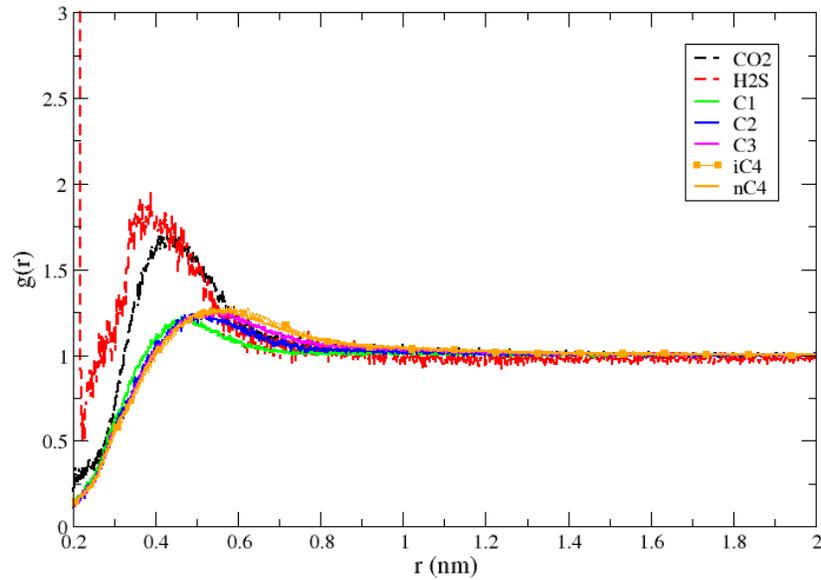


Figura B.2: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $H_2S$ . A 0% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $CO_2$ , línea punteada roja es  $H_2S$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

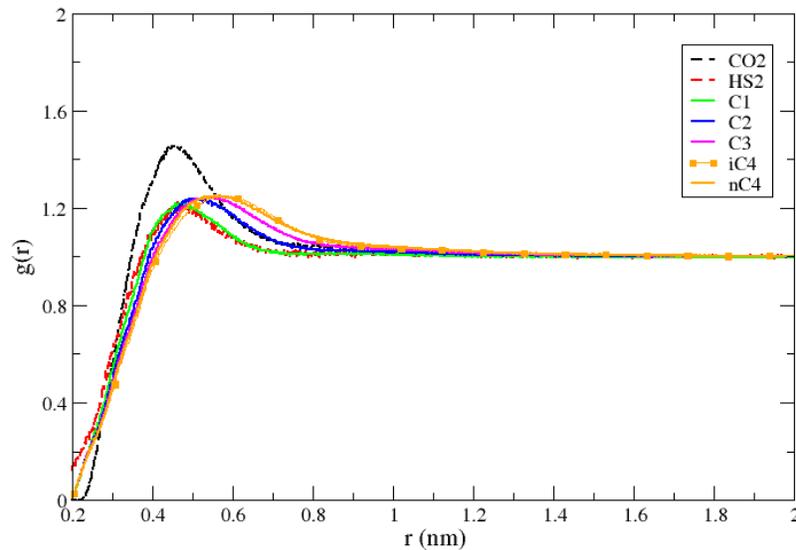


Figura B.3: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $CH_4$ . A 0% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $CO_2$ , línea punteada roja es  $H_2S$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

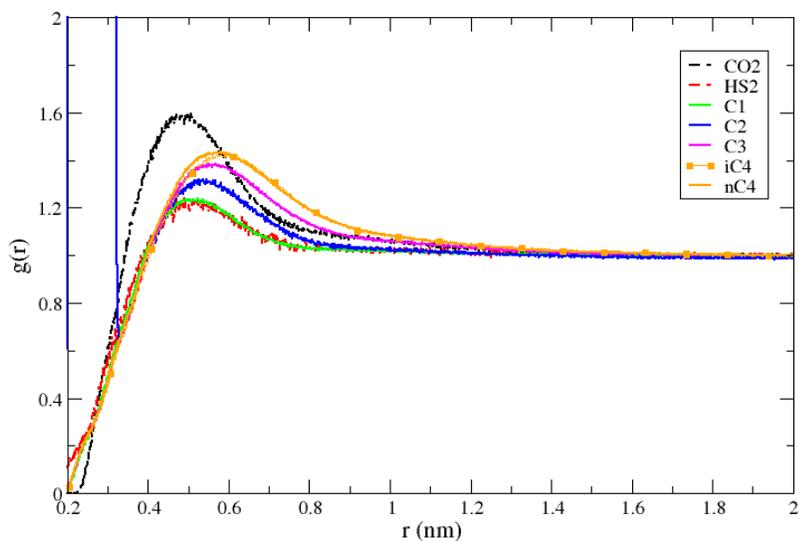


Figura B.4: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{C}_2\text{H}_6$ . A 0% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

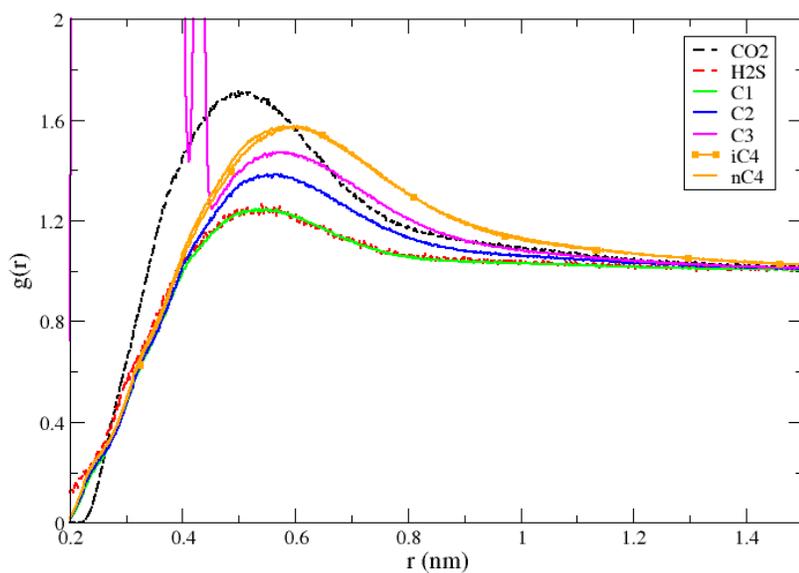


Figura B.5: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{C}_3\text{H}_8$ . A 0% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

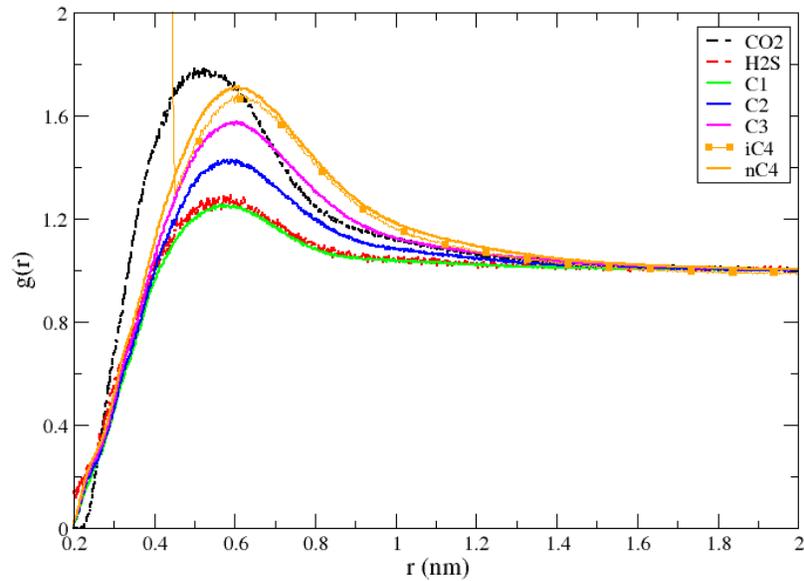


Figura B.6: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ . A 0% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

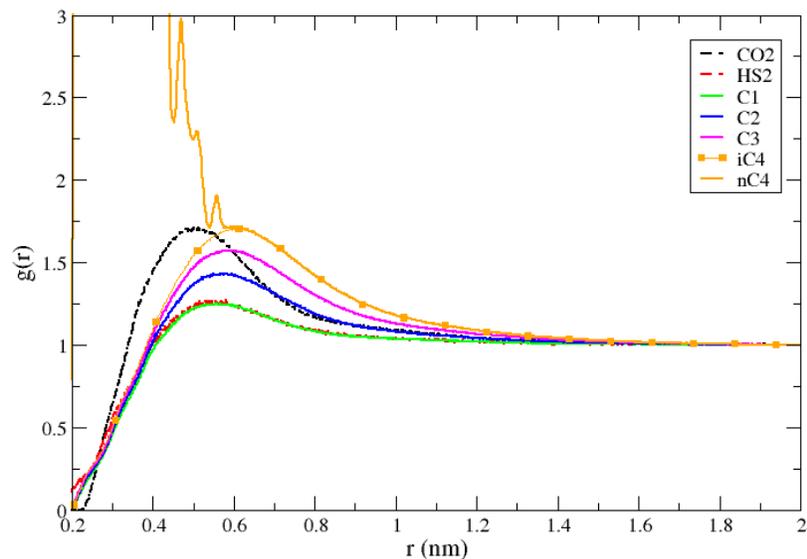


Figura B.7: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ . A 0% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

## B.2. Gas comprimido con 25 % de fracción molar de agua.

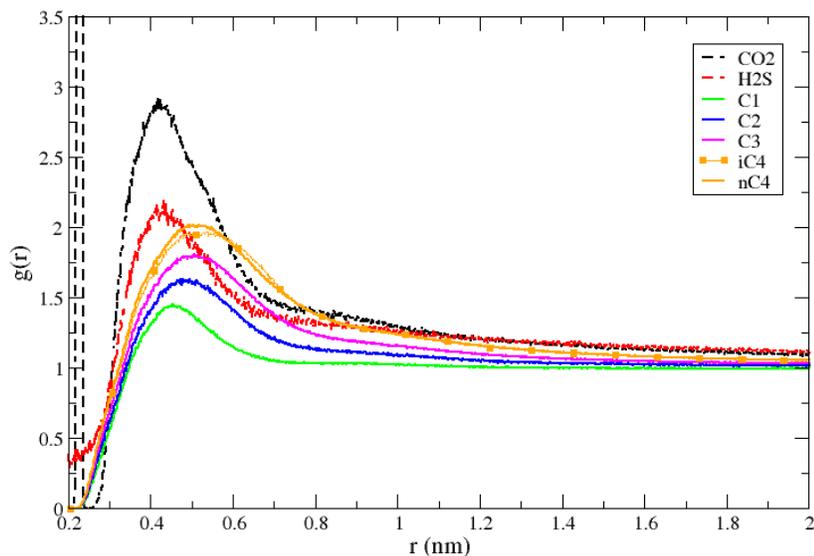


Figura B.8: Función de distribución radial contra la distancia  $r$ (nm) tomando de referencia al  $CO_2$ . A 25 % de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $CO_2$ , línea punteada roja es  $H_2S$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

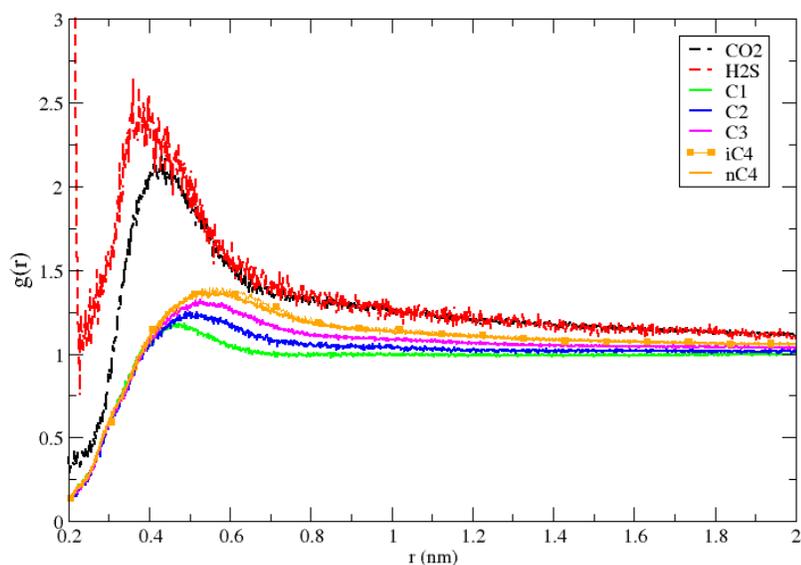


Figura B.9: Función de distribución radial contra la distancia  $r$ (nm) tomando de referencia al  $H_2S$

.A 25 % de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $CO_2$ , línea punteada roja es  $H_2S$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

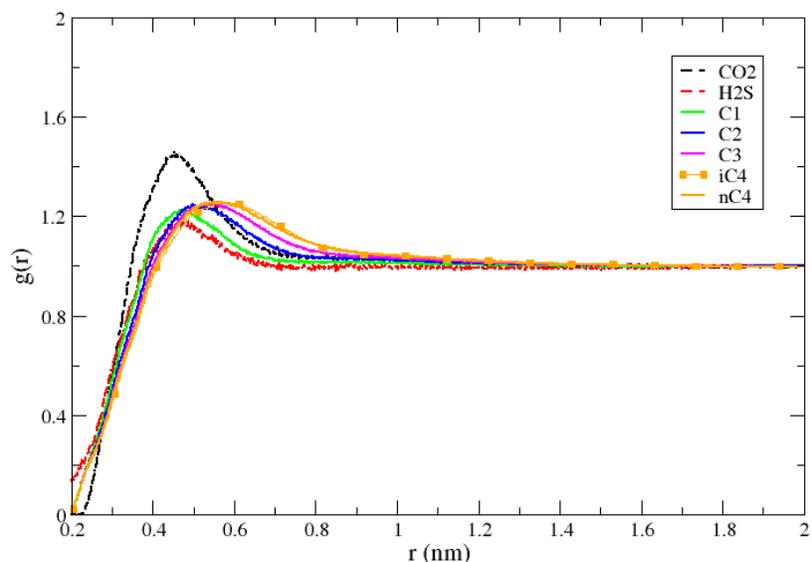


Figura B.10: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{CH}_4$ . A 25% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

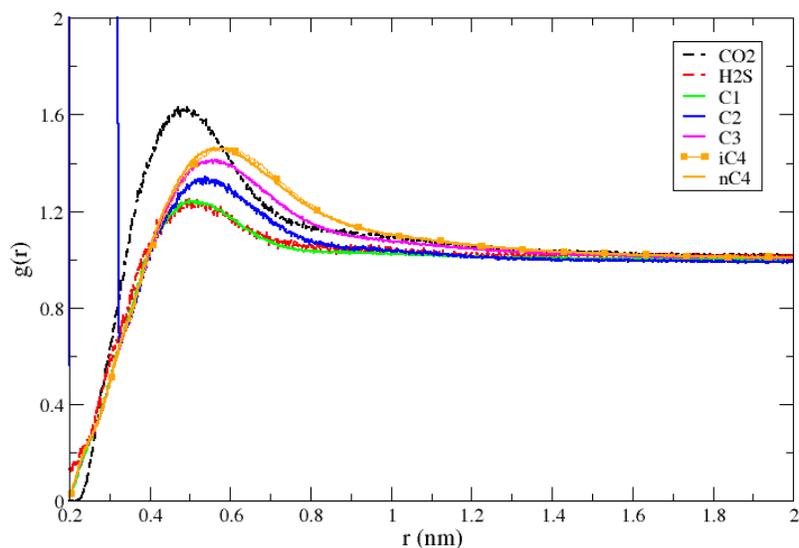


Figura B.11: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{C}_2\text{H}_6$ . A 25% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

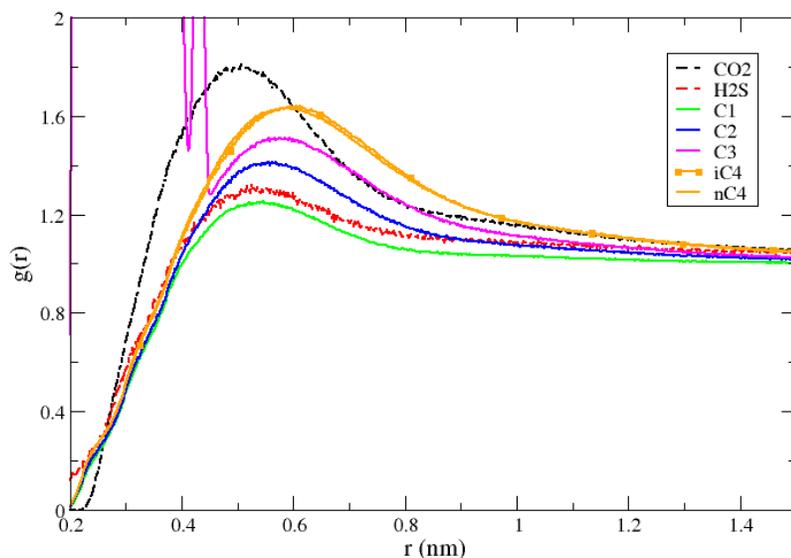


Figura B.12: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{C}_3\text{H}_8$ . A 25% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

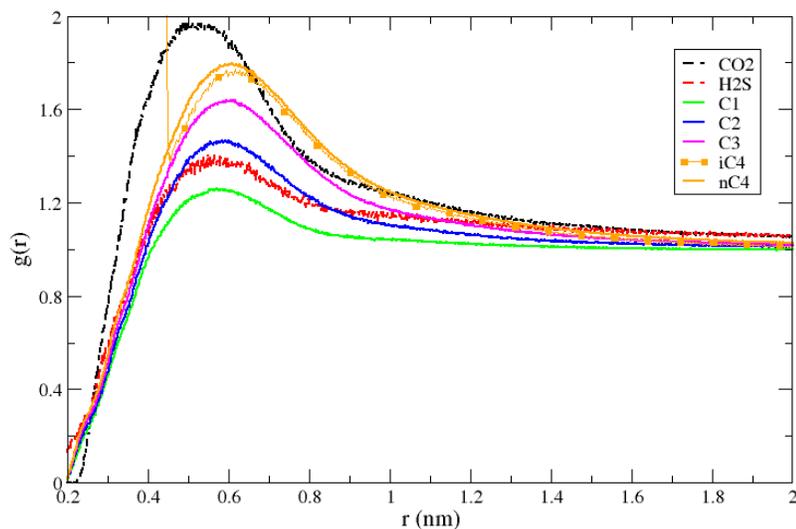


Figura B.13: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{i-C}_4\text{H}_{10}$ . A 25% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

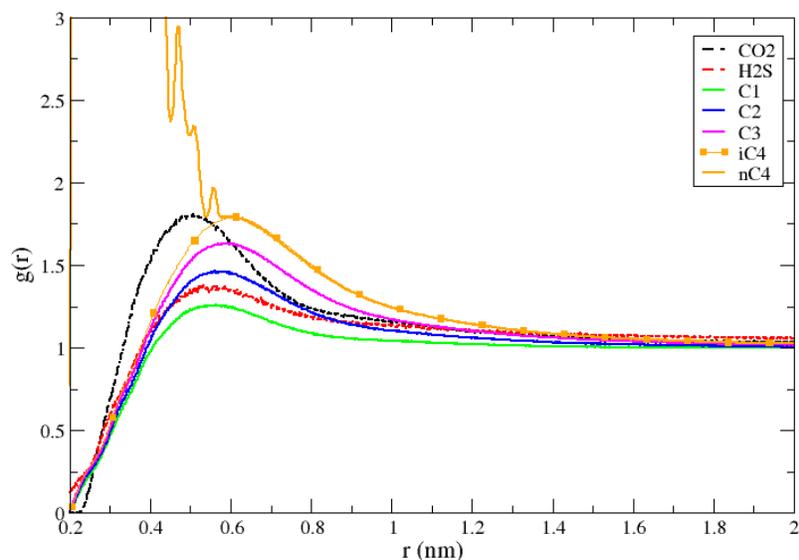


Figura B.14: Función de distribución radial contra la distancia  $r$ (nm) tomando de referencia al  $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ . A 25 % de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

### B.3. Gas comprimido con 50 % de fracción molar de agua.

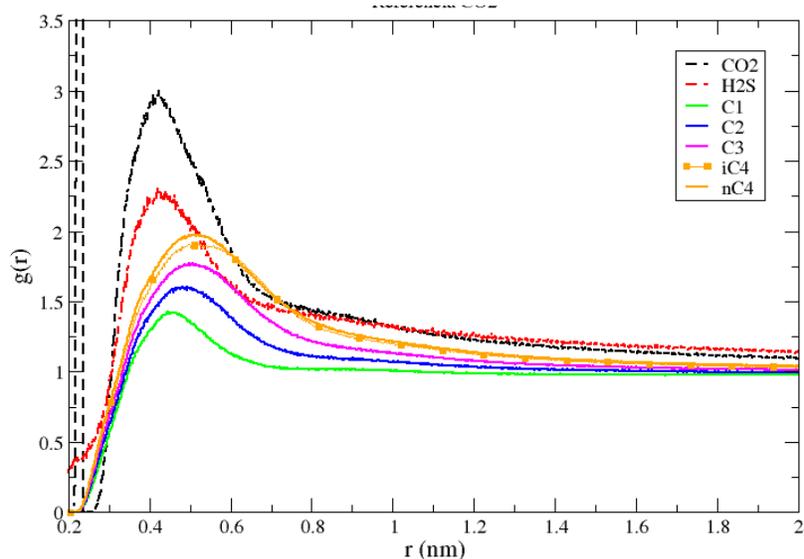


Figura B.15: Función de distribución radial contra la distancia  $r$ (nm) tomando de referencia al  $\text{CO}_2$ . A 50% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

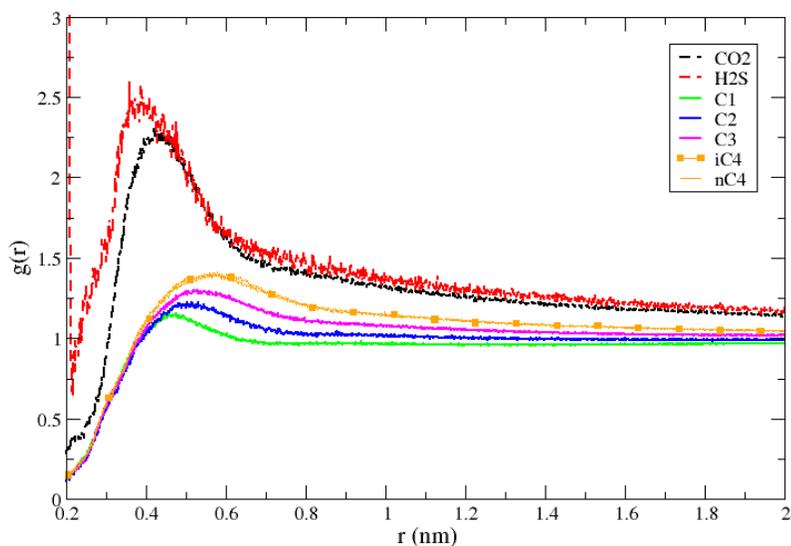


Figura B.16: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{H}_2\text{S}$ . A 50% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

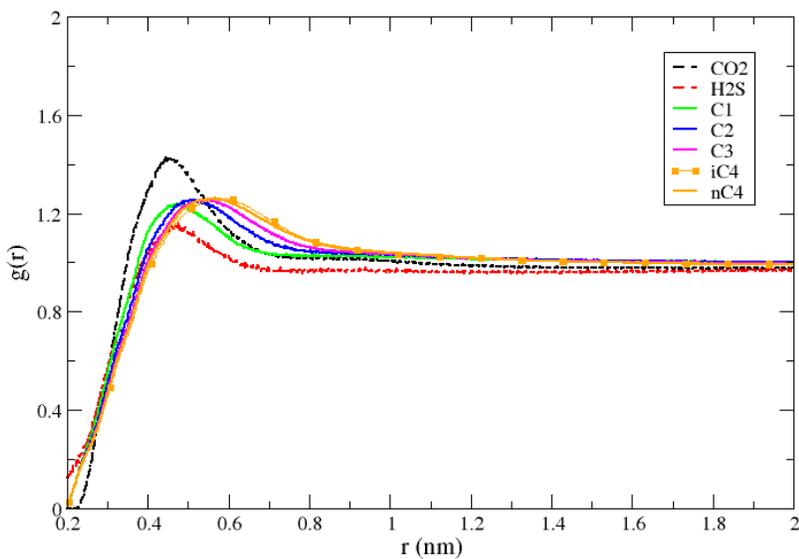


Figura B.17: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{CH}_4$ . A 50% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

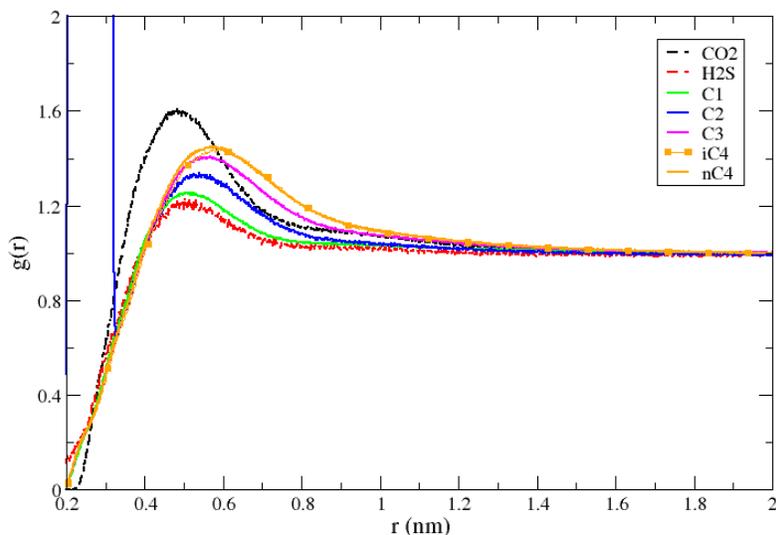


Figura B.18: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{C}_2\text{H}_6$ . A 50% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

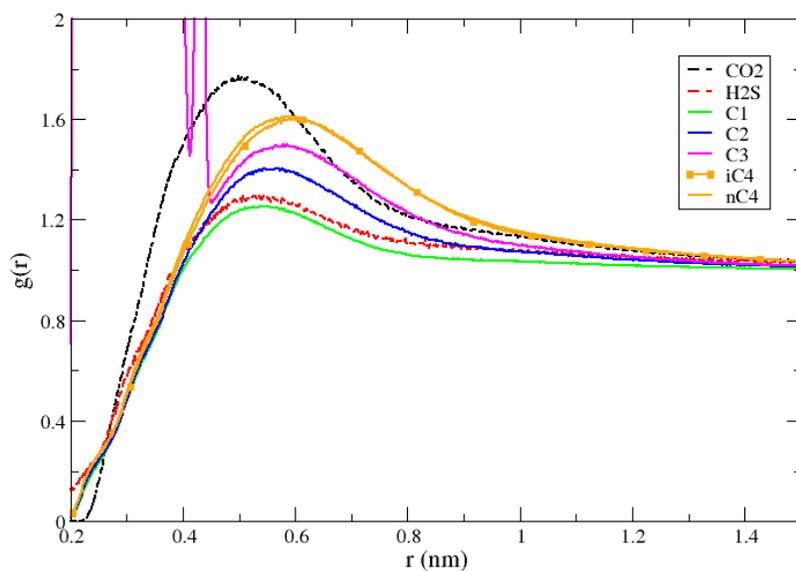


Figura B.19: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{C}_3\text{H}_8$ . A 50% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

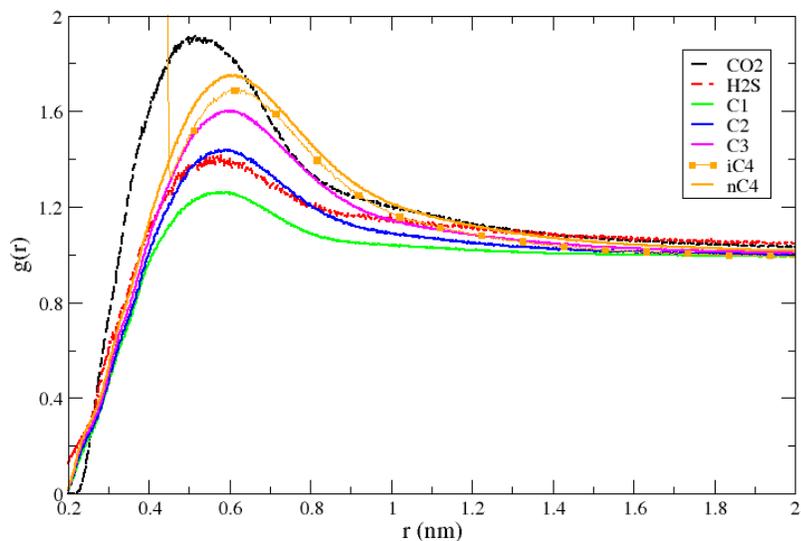


Figura B.20: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ . A 50% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

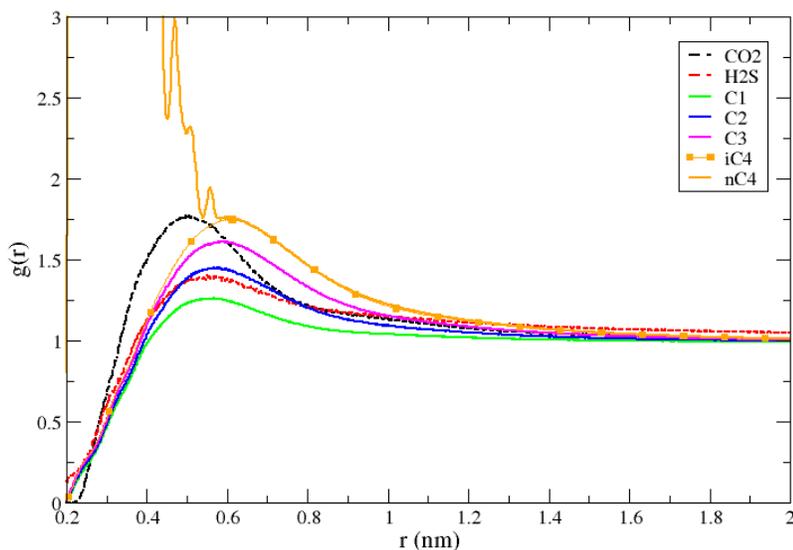


Figura B.21: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ . A 50% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

## B.4. Gas comprimido con 75 % de fracción molar de agua.

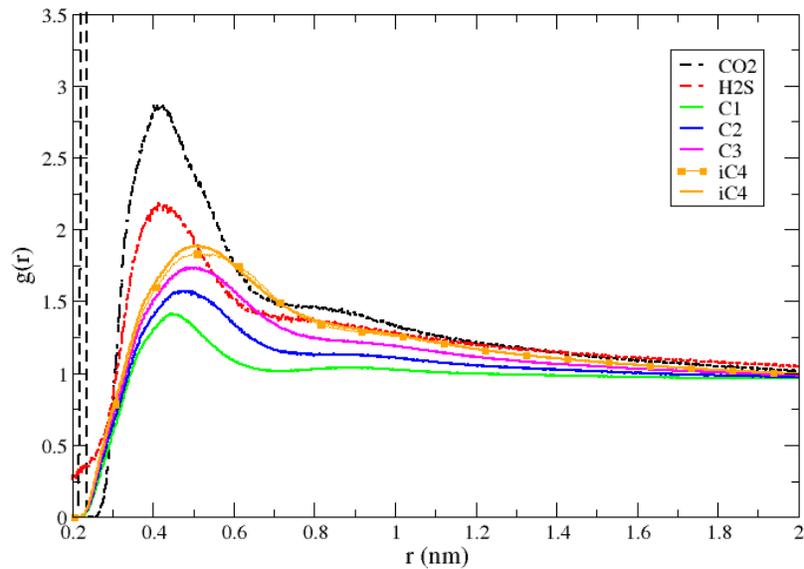


Figura B.22: Función de distribución radial contra la distancia  $r$ (nm) tomando de referencia al  $CO_2$ . A 75% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $CO_2$ , línea punteada roja es  $H_2S$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

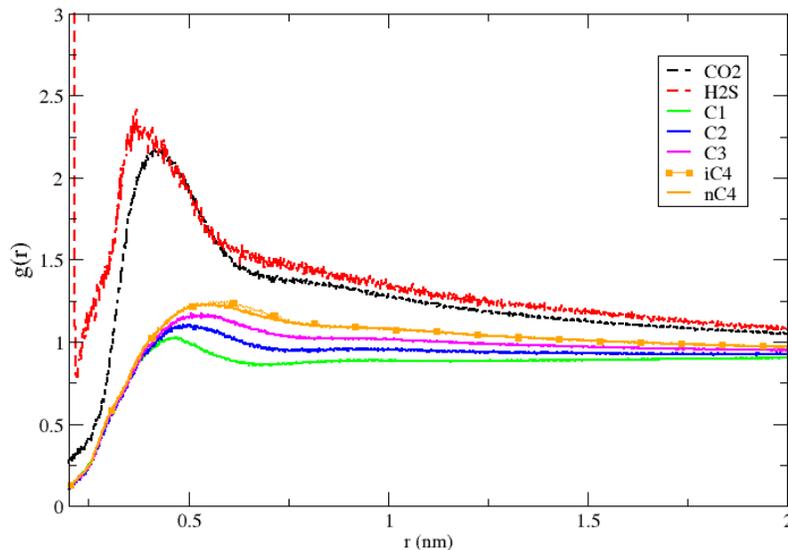


Figura B.23: Función de distribución radial contra la distancia  $r$ (nm) tomando de referencia al  $H_2S$ . A 75% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $CO_2$ , línea punteada roja es  $H_2S$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

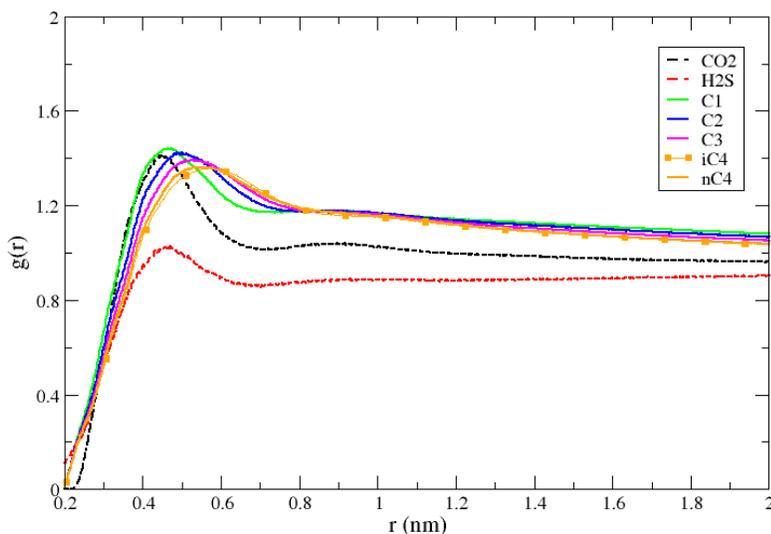


Figura B.24: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{CH}_4$ . A 75% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

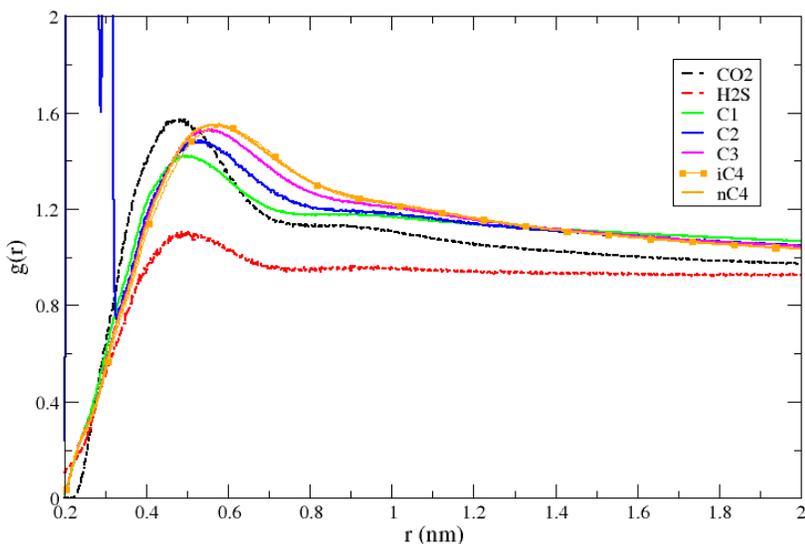


Figura B.25: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{C}_2\text{H}_6$ . A 75% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

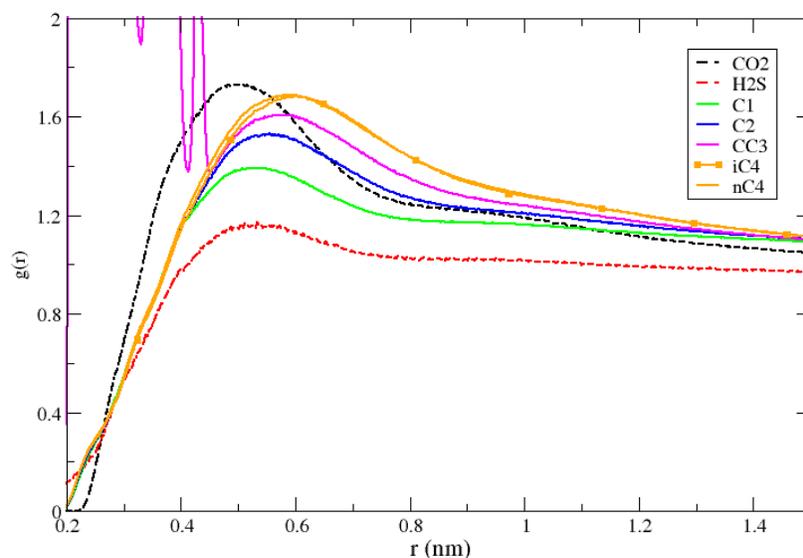


Figura B.26: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{C}_3\text{H}_8$ . A 75% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

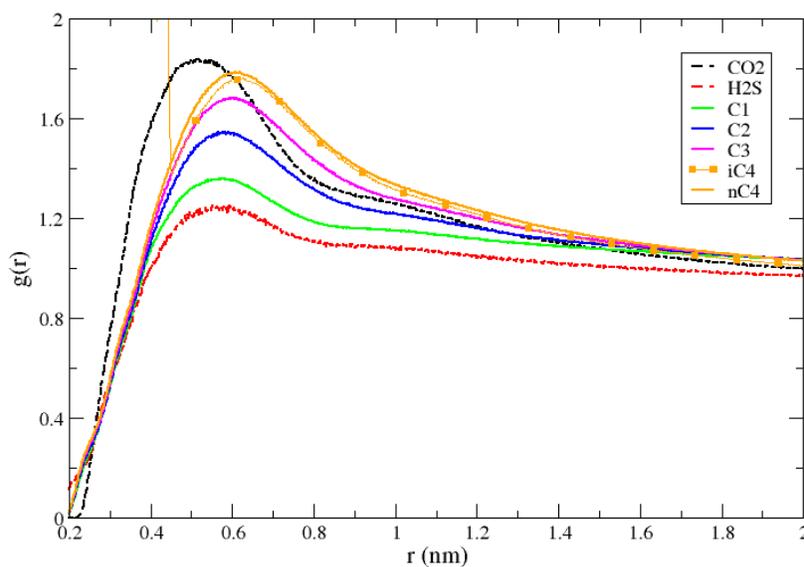


Figura B.27: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $\text{i-C}_4\text{H}_{10}$ . A 75% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

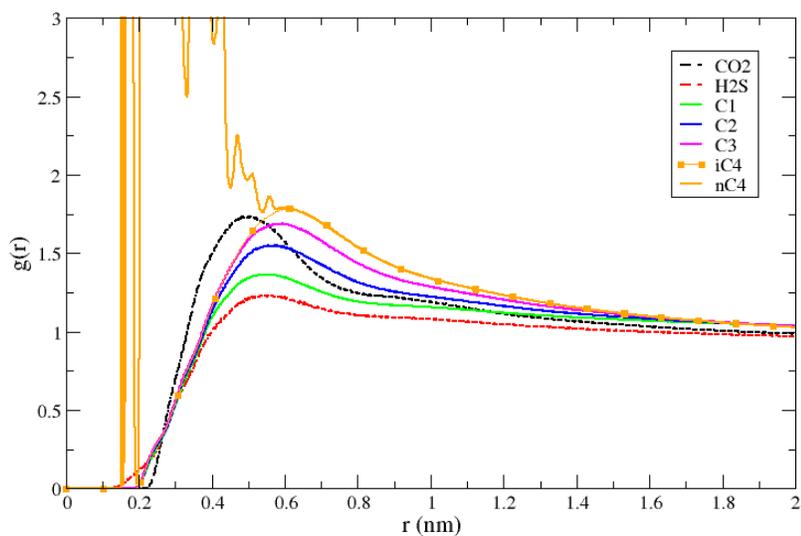


Figura B.28: Función de distribución radial contra la distancia  $r(\text{nm})$  tomando de referencia al  $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ . A 25% de fracción molar de agua. El código de colores es: línea punteada negra para  $\text{CO}_2$ , línea punteada roja es  $\text{H}_2\text{S}$ , línea verde es para el metano, línea azul etano, línea rosa el propano, línea naranja n-butano y línea naranja con cuadros indica el isobutano.

# Apéndice C

## Estancia-Universidad de Calgary- Método Lattice Boltzmann

Se presentó la oportunidad de realizar una estancia de 5 semanas en la Universidad de Calgary, en el grupo de medios porosos, bajo la supervisión del Dr. Hossein Hejazi, y con el soporte del Dr. Muhammad Fowaz Ikram. Se realizaron actividades de diferente índole, se asistió a las reuniones del grupo como a los seminarios obligatorios en el departamento para los alumnos de posgrado. Se indagó sobre el método de lattice Boltzmann para el estudio del comportamiento de fluidos. En este anexo se presenta un poco de lo que se realizó en el tiempo de la estancia (actividades académicas) y una presentación breve de lo realizado y los resultados obtenidos en la estancia.

La estancia se consideró importante tanto en el aspecto académico ya que tuve la oportunidad de aprender otra clase de modelos matemáticos y herramientas computacionales para el estudio de los materiales, y a su vez importante en el aspecto del crecimiento personal y la inmersión del conocimiento en un nuevo contexto.

### C.1. Actividades realizadas

Breve descripción y mención de algunas de las actividades realizadas en la Universidad de Calgary.

- 19-23 de marzo: (1) Asistencia a la reunión de catálisis Universidad de Calgary-IPICYT. (2) Reunión con el Dr. Hossein.
- 26-30 de marzo: (1) Revisión de los conceptos fundamentales del método de lattice boltzmann, (2) Ejercicios de la teoría, (3) ejemplos simples de palabras, (4) ejemplos en openMLB, (5) familiarizarse con el uso del visor paraview.
- 2-6 de marzo: (1) asistencia al seminario del grupo de fluidos y medios porosos, (2) ejemplos simples con códigos simples gratuitos para c ++ (openBLM) e inspeccioné los códigos para encontrar el lugar de los parámetros importantes. (3) Ejemplos (tuto-

rial / showcases / codes) palabras, inspección del código, ubicación de los parámetros de interés. Realización de los cursos requeridos para poder acceder al laboratorio (4) Curso WHMIS 2015, (5) Entrenamiento de Evaluación de Riesgos y (6) Curso de Orientación de Seguridad y Salud Laboral.

- 9-13 de abril: (1) Entrenamiento de Respuesta ante Derrames, (2) Asistencia a la conferencia "Microfluid methods for gaining mechanistic understanding of the water in oil emulsion problem in bitumen froth treatment", (3) asistencia a la reunión del grupo, (4) se continuo con el trabajo de LBM, (5) se hizo la revisión de la conversión de unidades físicas a unidades de lattice.
- 16-20 de marzo: (1) Conversión entre unidades físicas y unidades de lattice, (2) asistencia a la conferencia "Breathing new life into old antibiotics: making a case for natural extracts in the fight against antibiotic resistance", (3) asistencia a la reunión del grupo, (4) se continuo con el trabajo de LBM y (5) revisión de medidas de seguridad y comportamiento correcto en el laboratorio (actividad práctica)
- 23-27 de marzo: (1) asistencia a la reunión del grupo, (2) Presentación de avances y resultados de estancia en la reunión de grupo, (3) elaboración del informe de actividades y (4) asistencia ala reunión con el Dr. Hossein para la revisión de resultados.

## C.2. Método Lattice Boltzmann

Los métodos de Lattice Boltzmann (LBM) métodos de dinámica de fluidos computacional, diseñados para la simulación de fluidos. La ventaja que presenta es que en lugar de tener que resolver las **ecuaciones de Navier-Stokes**, lo que hace este método es resolver la ecuación discreta de Boltzmann para simular el flujo de un fluido newtoniano con modelos de colisión como **Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)** [41]. Al simular los procesos de transmisión y colisión en un número limitado de partículas, las interacciones de partículas intrínsecas evidencian un microcosmos de comportamiento de flujo viscoso aplicable a través de la masa mayor.

### C.2.1. Introducción

LBM modela el fluido que consiste en partículas ficticias y dichas partículas realizan procesos de propagación y colisión consecutivos sobre una malla discreta. LBM presenta varias ventajas sobre otros métodos para el estudio de la dinámica de fluidos convencionales, especialmente en el tratamiento de límites complejos, la incorporación de interacciones microscópicas y la paralelización del algoritmo [42].

La base del método de Boltzmann es la función de distribución, el cual es un parámetro importante para caracterizar el efecto de las moléculas. Lo que nos indica esta relación es que porcentaje de moléculas en cierta ubicación de un contenedor tiene velocidades con un cierto rango, en un instante dado de tiempo. Entonces tenemos una función que depende de

la posición, la velocidad y el tiempo. En otros detalles del libro, la distribución funciona como la probabilidad de encontrar una molécula particular con una posición e impulso dados  $[f(x, p, t)]$ . Entonces, si hacemos algunas suposiciones y expansiones, podemos obtener la ecuación de Boltzmann. La ecuación de Boltzmann mostró que el número de estados microscópicos disponibles para una energía dada es mucho mayor para los valores macroscópicos correspondientes al equilibrio térmico, por lo que la probabilidad de estar en estado con energía  $E$  nos da la distribución de Boltzmann.

Entonces la ecuación de Boltzmann es una ecuación diferencial integral no lineal y es particularmente complicada, entonces para resolver esto usamos la solución de aproximación. Los métodos numéricos de solución del sistema de ecuaciones diferenciales parciales dan lugar a un mapa discreto, que puede interpretarse como la propagación y la colisión de partículas ficticias.

Entonces, si pensamos solo en la **función de distribución** tenemos una descripción estadística de nuestro sistema, y en un sistema cerrado el número de moléculas antes y después de la perturbación es el mismo, así que la diferencia entre la función de distribución de funciones antes y después de la perturbación da una cero, pero sin colisión saldrá una diferencia en el número de moléculas y esta nombrada como omega ( $\omega$  operador de colisión)

$$f(r + cdt, c + Fdt, t + dt)drdc - f(r, c, t)drdc = \omega(f)drdc dt \quad (C.1)$$

donde  $\omega(f) = df/dt$  es la tasa total de cambio de la función de distribución es igual a la tasa de la colisión. Si en esta ecuación C.1 escribimos la diferencial de  $f(r, c, t)$  y la dividimos por  $dt$ , y recordamos la relación  $\omega(f) = df/dt$ , se obtiene:

$$\omega(f) = c \frac{df}{dr} + \frac{F}{m} \frac{df}{dc} + \frac{df}{dt} \quad (C.2)$$

en la ecuación C.2 tenemos en la mano derecha la parte de transmisión y la parte de colisión izquierda de la ecuación. Entonces, omega es una función de  $f$  necesita determinarse para resolver la ecuación de Boltzmann, y esta es la piedra angular del método de lattice boltzmann, depende de la forma en que tipo de propiedades queremos medir.

Con los métodos de retícula de Boltzmann, resolvemos aproximadamente la ecuación desde la perspectiva de la partícula y nos centramos en una ecuación muy similar; contiene explícitamente la noción colisionar y relajación central para LBM ”.

No ondearemos más en el concepto sin embargo es importante mencionar que por ciertas conexiones físicas y matemáticas se puede obtener la relación directa de la función de distribución con cantidades macroscopias. Tales como: densidad del fluido, velocidad del fluido y energía interna).

- Densidad del fluido

$$\rho(r, t) = \int m * f(r, c, t) dc \quad (C.3)$$

- Densidad del fluido y velocidad

$$\rho(r, t)u(r, t) = \int m * c * f(r, c, t) dc \quad (C.4)$$

- Densidad del fluido y energía interna

$$\rho(r,t)e(r,t) = \frac{1}{2} \int m * u_z^2 * f(r,c,t) dc \quad (C.5)$$

donde  $\rho$  es densidad,  $u$  velocidad del fluido,  $e$  energía interna,  $m$  masa molecular,  $u_z^2$  velocidad relativa de la partícula ( $u_a = c - u$ ). Y una de las aproximaciones existentes es la solución Bhatnagar, Gross y Krook (BGK), que simplificó el modelo para el operador de colisión.

$$\Omega = \omega(f^{eq} - f) = \frac{1}{\tau}(f^{eq} - f) \quad (C.6)$$

donde  $\omega$  es la frecuencia de colisión ( $\omega = 1$ ), es el ( $\tau$ ) factor de relajación,  $f$  la función de distribución y ( $f^{eq}$ ) es la distribución de equilibrio local (función de distribución de maxwell-boltzmann).

Entonces, si reescribimos la ecuación Boltzmann, tenemos:

$$\frac{df}{dt} + c \bullet \nabla f = \frac{1}{\tau}(f^{eq} - f) \quad (C.7)$$

En LBM, esta ecuación está discretizada y se supone que es válida según una dirección específica.

Comentarios importantes de la ecuación C.8:

1. Es una ecuación diferencial parcial lineal.
2. La ecuación parece una ecuación de advección con un término fuente.
3. El lado derecho de la ecuación representa la advección (relajación).
4. El término del lado izquierdo representa el proceso de colisión, término fuente.

Entonces discretizamos la ecuación C.8, quedando:

$$f_i(r + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(r, t) + \frac{\Delta t}{\tau} [f_i^{eq}(r, t) - f_i(r, t)] \quad (C.8)$$

La selección del número, las direcciones y la dimensión de los sistemas está en los arreglos de la red (lattice).

### Fluidos inmiscibles- método de multicomponentes

El tema de interés a estudiar es el modelado de fluidos inmiscibles, como es el caso de sistemas aceite-agua. Entonces para resolver este problema es necesario un modelo que capte la información de la interacción existente entre las partículas de las diferentes especies. Para el caso de la estancia se selecciono el modelo de Shan-Chen (el cual esta implementado en el código utilizado).

Los modelos Shan-Chen ampliamente utilizados para fluidos multicomponentes inmiscibles y para fluidos multifásicos de un componente se implementan en Palabos, en 2D y en 3D [42].

Este modelo parte de la definición de la existencia de una fuerza de interacción entre partículas para deducir posteriormente la ecuación de estado del sistema y su caracterización termodinámica. La definición de la fuerza de interacción se hace siguiendo ciertos principios:

- La fuerza total que actúa sobre las partículas situadas en  $x$  es la suma sobre todos los sitios de interacción posible ( $\bar{x}$ ).
- La fuerza de interacción es proporcional a la densidad en  $x$  y a la densidad en  $\bar{x}$ . Alternativamente, la utilización de un pseudo-potencial o densidad efectiva ( $\Psi(\rho)$ ) permite incrementar la estabilidad numérica.
- La dependencia espacial de la fuerza esta contenida en una función  $G(x, \bar{x})$ , llamada amplitud de fuerza.

Entonces la fuerza interacción en  $x$  puede escribirse de la siguiente manera:

$$F^{SC}(x) = -\Psi(s) \int (\bar{x} - x) G(x, \bar{x}) \Psi(\bar{x}) d^3\bar{x} \quad (C.9)$$

La elección de la forma concreta del pseudo-potencial está ligada a las restricciones de una simulación, que al comportamiento macroscópico del fluido.

La extensión a varios componentes es directa. La fuerza que actúa sobre las partículas de un componente  $\sigma$  es la suma de las fuerzas de interacción con el mismo y los demás componentes:

$$F^{SC}(x) = -\Psi(s) \sum_{\bar{\sigma}} \int (\bar{x} - x) G_{\sigma\bar{\sigma}}(x, \bar{x}) \Psi^{\bar{\sigma}}(\bar{x}) d^3\bar{x} \quad (C.10)$$

Pueden realizarse ciertas simplificaciones con el fin de discretizar la fuerza de Shan-Chen. La interacción entre partículas no vecinas es despreciable ( $G_{\sigma\bar{\sigma}} = 0$ , por encima de un cierto valor de  $|\bar{x} - x|$ ). Además, la amplitud de fuerza debe ser una función isotrópica. En lo que respecta a las amplitudes de fuerza, queda señalar que los valores de  $G_{\sigma\bar{\sigma}}$  va a ser considerados nulos. La atracción entre las partículas de la misma especie entraña la formación de un sistema multifásico.  $G$  es negativa cuando la fuerza es de atracción, y positiva cuando la fuerza es de repulsión.

**El principal atractivo del modelo es la manera natural en la cual ciertas propiedades macroscópicas surgen como simple resultado de las interacciones.**

## C.2.2. Metodología

Uso de Palabos, el cual es un solucionador de dinámica de fluidos computacional, de código abierto basado en el método de lattice Boltzmann.

Se trabajo con el método de Shan-Chen para multicomponentes,, se debe calcular un término de fuerza entre partículas que no es completamente local. Por lo tanto, este término de fuerza se calcula mediante un procesador de datos. Este procesador de datos necesita conocer la densidad y la velocidad en un nodo de red determinado (en el modelo de componentes múltiples, estas variables macroscópicas deben conocerse para todos los componentes). Para evitar calcular estas variables dos veces, ya que también deben conocerse para el siguiente paso de colisión normal, el procesador de datos las escribe en un escalar externo de la

celda y luego las reutiliza el objeto de dinámica para la colisión. Por lo tanto, es necesario utilizar un descriptor reticular que proporcione espacio para estos escalares externos, como ShanChenD2Q9Descriptor, o ForcedShanChenD2Q9Descriptor, si además del potencial entre partículas existe una fuerza externa del cuerpo. En 3D, los mismos descriptores están disponibles para el enrejado D3Q19 (y otros descriptores son fáciles de formular). Para asegurarse de leer las variables macroscópicas de los escalares externos durante el paso de colisión, utilice las clases ExternalMomentBGKdynamics o ExternalMomentRegularizedBGKdynamics para el modelo de fluido. Tenga en cuenta que en ambos modelos, el efecto del término de fuerza externa del cuerpo se contabiliza automáticamente si se define una fuerza externa en el descriptor de red. El término de fuerza luego es agregado por el procesador de datos Shan / Chen por medio de una corrección de momento a la velocidad de flujo. Por lo tanto, no necesita usar un modelo de colisión específico con un término de fuerza como GuoExternalForceBGKdynamics. Una dinámica simple de BGK, o dinámica BGK regularizada, está bien. Palabos también implementa el modelo de fluido multifásico 3D He / Lee, basado en dos poblaciones. Este modelo impone la incompresibilidad resolviendo una ecuación de evolución de la presión. Si bien es más complicado que el modelo Shan / Chen desde un punto de vista algorítmico, tiene la capacidad de simular mayores diferencias de densidad y viscosidad entre las dos fases, y elimina las velocidades espúreas en cierta medida.

### C.2.3. Resultados

Al igual que el sistema en cuestión es una especie de emulación clásica, primero fue necesario elegir un modelo para fluidos multicomponentes, en este caso trabajé con el modelo Shan-Chen, basado en el potencial de interacción intermolecular. Evaluamos algunos valores diferentes para fuerza de interacción y tiempo de relajación.

Se realizó la simulación de un sistema de 2 fluidos inmiscibles, en tres configuraciones diferentes. Se evaluó lo burdo del código y los parámetros de mayor importancia en el modelo, como es el caso de la fuerza de interacción  $\Psi$ , y el tiempo de relajación ( $\tau$ ).

#### Dos Capas.

La primera configuración evaluada es donde tenemos ambos fluidos inmiscibles, el menos denso se encuentra en la parte inferior y el más denso en la parte superior, se utiliza la inestabilidad de Reyleigh-Taylor para generar una perturbación en la interfase de los fluidos.

A continuación se muestra el resultado de algunos de los casos evaluados, solamente se seleccionaron algunos casos, aquellos con lo que se pudiera observar el efecto de los parámetros de interés en el modelo.

- **Caso 1:**

En el cuadro se muestran los valores de los parámetros tomados en cuenta para realizar la simulación. En la Figura C.1 se presenta la evolución del sistema considerando una  $G$  de 1.2 y  $\tau_1 = \tau_2 = 1,0$ , en el panel se puede apreciar como después de generar

la perturbación, la presencia y ubicación de la interfase entre los fluidos comienza a fluctuar, el fluido rojo empieza a descender, fluctuando pero principalmente tiende a estabilizarse en la base del sistema, sin embargo por el tiempo de relajación seleccionado no se tiene el numero suficiente de pasos para lograr a un sistema estable (que el fluido más denso se ubique completamente en la base).

```

const T_omega1 = 1.0;
const T_omega2 = 1.0;
const plint_nx = 1200;
const plint_ny = 400;
const T_G = 1.2;
T_force = 0.15/(T)ny;
const plint_maxIter = 16000;
const plint_saveIter = 100;
const plint_statIter = 10;

```

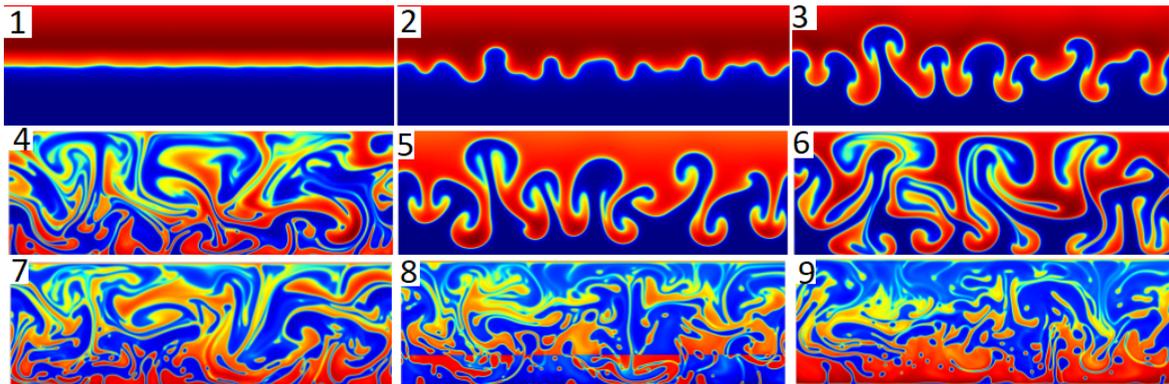


Figura C.1: Evolución del sistema, dos fluidos inmiscibles el más denso se ubica en la parte superior al inicio. Con  $G$  de 1.2,  $\tau_1 = \tau_2 = 1$ .

■ **Caso 2:**

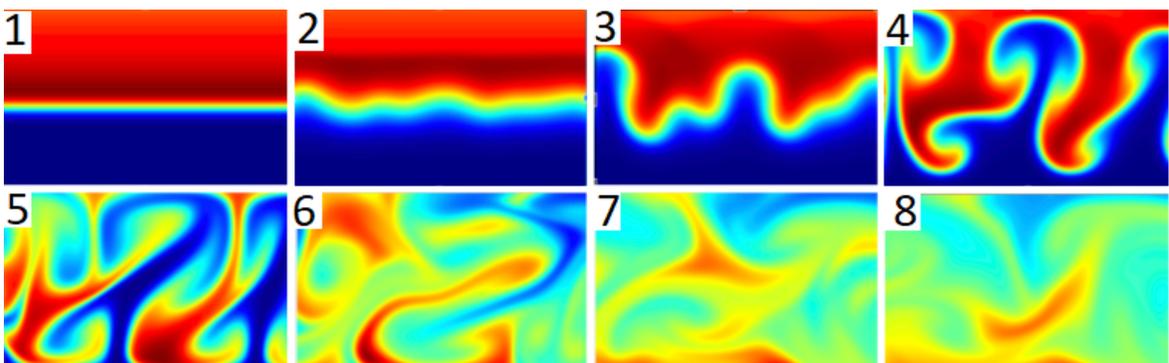


Figura C.2: Evolución del sistema, dos fluidos inmiscibles el más denso se ubica en la parte superior, al inicio.  $G=0.2$ ,  $\tau_1 = 1,0$  y  $\tau_2 = 1,0041$ .

En el cuadro se muestran los valores de los parámetros tomados en cuenta para realizar la simulación. En la Figura C.2 se presenta la evolución del sistema considerando

una  $G$  de 0.2 y  $\tau_2 = 1,0041$ , en el panel se puede apreciar como después de generar la perturbación, la presencia y ubicación de la interfase entre los fluidos comienza a fluctuar, el fluido rojo (fluido más denso) trata busca re-ubicarse en la parte inferior de la bicapa, sin embargo al bajar no se consigue una separación entre los componentes nuevamente, obteniendo un componente (mezcla de los dos primeros) indicado de otro color, esto es debido a pequeño valor que se selección para la fuerza de interacción entre partículas ( $G$ ).

```

const T omega2 = 1.0041;
const plint nx = 1200;
const plint ny = 400
const T G = 0.2;
T force = 0.15/(T)ny; const plint maxIter = 16000;
const plint saveIter = 100;
const plint statIter = 10;

```

■ **Caso 3:**

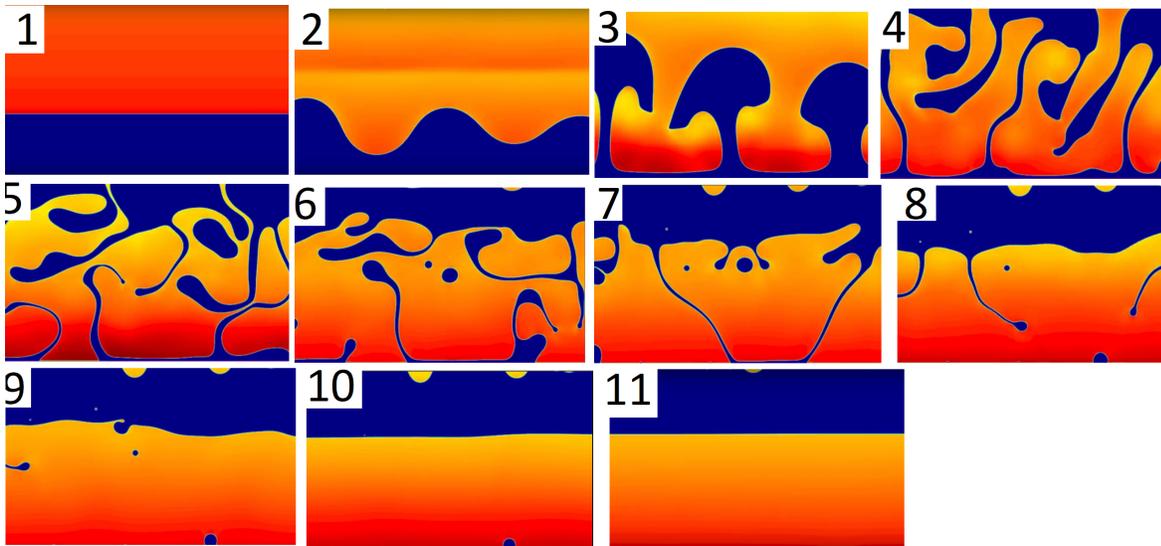


Figura C.3: Evolución del sistema, dos fluidos inmiscibles el más denso se ubica en la parte superior, al inicio. Con una  $G$  de 2.1,  $\tau_1 = 1,0$ ,  $\tau_2 = 0,5$ .

En el cuadro se muestran los valores de los parámetros tomados en cuenta para realizar la simulación. En la Figura C.3 se presenta la evolución del sistema considerando una  $G$  de 2.1 y  $\tau_1 = 1,0$ ,  $\tau_2 = 0,50$ , en el panel se puede apreciar como después de generar la perturbación, la presencia y ubicación de la interfase entre los fluidos comienza a fluctuar, el fluido rojo empieza a decender lenta pero precisamente, hasta estabilizarse en la base del sistema.

```

const T omegal = 1.0;
const T omega2 = 0.50;
const plint nx = 1200;
const plint ny = 400;
const T G = 2.1;
T force = 0.15/(T)ny;
const plint maxIter = 16000;
const plint saveIter = 100;
const plint statIter = 10;

```

## Gota

El siguiente caso es un caso muy similar en cuestión de que se esta trabajando con fluidos inmiscibles entre sí. Se tiene una gota de un fluido con mayor densidad en el centro y esta rodeado de un fluido menos denso, el propósito de esta evaluación es observar la estabilidad y el comportamiento de a gota en el sistema, los parámetros importantes en este código son los mismos que el del caso anterior (tiempo de relajación y fuerza de interacción). Se presentan los casos homólogos a la Figura C.1 y C.3, ya que tienen los mismos parámetros establecidos.

### ■ Caso 1:

En el cuadro se muestran los valores de los parámetros tomados en cuenta para realizar la simulación. En la Figura C.4 se presenta la evolución del sistema considerando una  $G$  de 1.2 y  $\tau_1 = \tau_2 = 1,0$ . En la Figura C.4 donde se aprecia la evolución del sistema, se ve como las paredes de la gota fluctúan, la gota se va deformando poco a poco, perdiendo la estabilidad, el liquido comienza a difundir en el sistema, el centro se sigue manteniendo rojo pero se ve un mayor número de colores los cuales nos indican interacciones entre las partículas de ambos fluidos.

```

const T omegal = 1.0;
const T omega2 = 1.0;
const plint nx = 1200;
const plint ny = 400;
const T G = 1.2;
T force = 0.15/(T)ny;
const plint maxIter = 16000;
const plint saveIter = 100;
const plint statIter = 10;

```

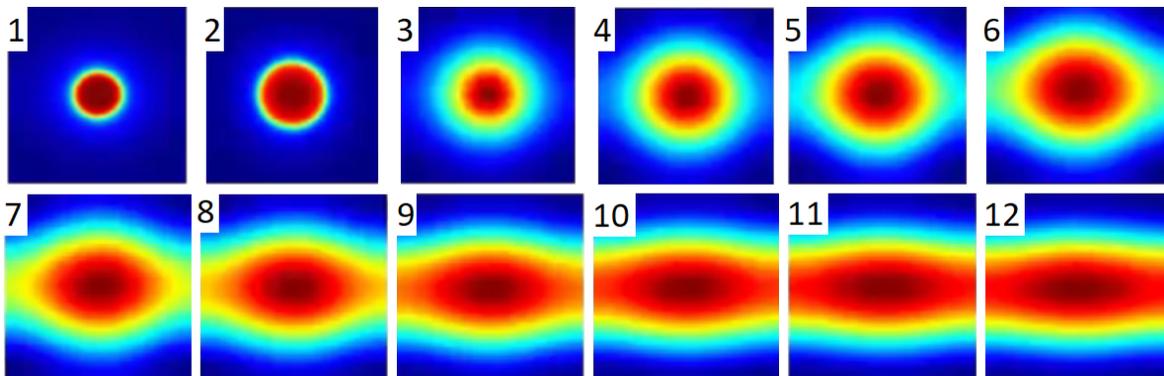


Figura C.4: Evolución del sistema, una gota de un fluido más denso (rojo). Con una  $G = 1,2$ ,  $\tau_1 = \tau_2 = 1$ .

## ■ Caso 2:

En el cuadro se muestran los valores de los parámetros tomados en cuenta para realizar la simulación. En la Figura C.5 se presenta la evolución del sistema considerando una  $G$  de 2.1 y  $\tau_1 = 1,0$  y  $\tau_2 = 1,0$ . En la Figura C.5 donde se puede ver la evolución del sistema, no se aprecia cambio en la forma de la gota o tamaño de la interfase entre fluidos, esto indica como la fuerza de interacción entre las partículas del mismo tipo es lo suficiente como para que la gota no presente inestabilidad, la forma donde el sistema es más estable es la configuración inicial, por lo que es invariante en el tiempo.

```
const T omegal = 1.0;
const T omega2 = 0.5;
const plint nx = 1200;
const plint ny = 400;
const T G = 2.1;
T force = 0.15/(T)ny;
const plint maxIter = 16000;
const plint saveIter = 100;
const plint statIter = 10;
```

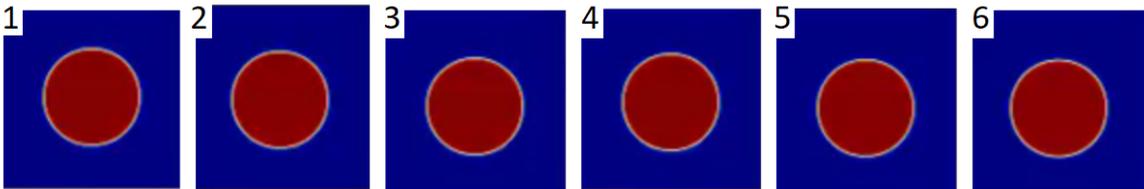


Figura C.5: Evolución del sistema, una gota de un fluido más denso (rojo). Con una  $G = 2,1$ ,  $\tau_1 = 1,0$  y  $\tau_2 = 1,0$ .

## Emulsión

En la segunda configuración se presenta una emulsión de dos fluidos inmiscibles dispersos entre sí, se genera una perturbación para inestabilizar la emulsión y ver el efecto en el sistema.

Este ejemplo es igual para mostrar el caso de fluidos inmiscibles usando el modelo de Shan-Chen, sin embargo este código tal cual es muy burdo ya que tolera una gran cantidad de cambio en los parámetros importantes (como en la función de distribución, el tiempo de relajación y la fuerza de interacción) obteniéndose el mismo comportamiento en el sistema, sin embargo después de ciertos valores la simulación se vuelve inestable y hace "colapsar". El comportamiento que se puede observar en este ejemplo es como tenemos dos fluidos inmiscibles dispersos entre si, al generarse la perturbación el sistema busca encontrar una configuración de menor energía (mayor estabilidad), por lo que lo que los fluidos se separan entre sí, para este caso tenemos uno en menor cantidad por lo que forma gotas de gran tamaño ene l sistema, se puede ver como la gota tiende a ser esférica, recordando que esta es la configuración de menor energía debido a que se encuentra rodeada de un líquido con el cual no es compatible. El comportamiento descrito se puede observar claramente en la Figura C.6 donde se muestra la evolución del sistema, con una fuerza de interacción negativa de 120 ( $G=-120$ ),  $\rho = 200$  y  $\Delta\rho = 1,0$ , el caso mostrado se presenta en el libro de "SUKOP" [42].

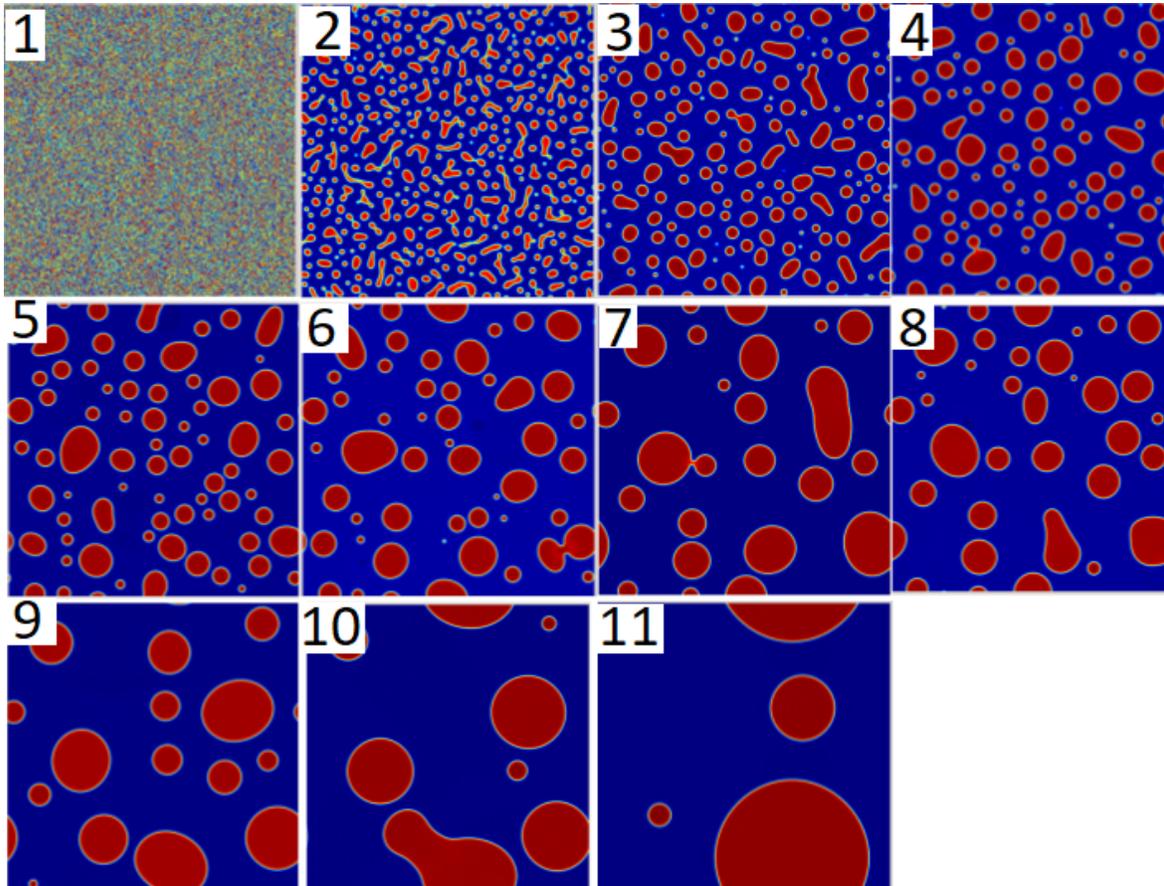


Figura C.6: Evolución del sistema, dos fluidos inmiscibles dispersos entre si.  $G=-120,0$ ,  $\rho = 200,0$ ,  $\tau = 1,0$  y  $\Psi = 4,0$ .

#### C.2.4. Conclusiones

Por encima de un valor crítico de  $G$ , dos componentes inicialmente mezclados se separan espontáneamente formando una interfase más o menos definida.

El modelo de Shan-Chen el cual toma en cuenta la interacción entre las partículas, donde en valores positivos es la fuerza de atracción entre las partículas del mismo tipo y en valores negativos indica la fuerza de repulsión entre partículas de diferente tipo, juega un papel de suma importancia tanto en la estabilidad de las simulaciones como el comportamiento de los fluidos evaluados. Dicho parámetro indica el tipo de interacción y la compatibilidad entre los diferentes fluidos emulados, pudiendo generar comportamientos de difusión, de separación, de mezclas, entre otros. El parámetro del tiempo de relajación es el que nos ayuda a emular las propiedades de viscosidad y densidad del fluido de interés.

El modelo multicomponente Sha-Chen no soporta una diferencia importante entre los parámetros, esto quiere decir que la diferencia de densidad entre los fluidos simulados no puede ser muy grande ya que el calculo hace "colapsar". En un rango de los valores del parámetro de relajación y la fuerza de interacción, Shan-Chen es un buen método para componentes múltiples pero no puede simular problemas en una amplia gama de números Reynolds.



## FACULTY OF GRADUATE STUDIES

Earth Sciences Building, Room 1010  
2500 University Drive NW  
Calgary, AB, Canada T2N 1N4  
grad.ucalgary.ca

April 19, 2018

2312 Capitol Hill Crescent NW  
Calgary AB T2M 4C1

**NAME: Olga Leticia Ramirez Ramirez**  
**DATE OF BIRTH: 1996/10/24**

Dear Olga:

On the recommendation of the Department of Chemical and Petroleum Engineering, I am pleased to offer you admission into the Faculty of Graduate Studies in the VISITING STUDENT RESEARCHER program, for the period beginning March 27, 2018 and ending April 30, 2018. Your supervisor is Dr. Hossein Hejazi.

**Your University of Calgary Student Identification Number is UCID# 10184325.**

You will find useful information for new graduate students on our website at: [Guide for Newly Admitted Students](#)

**Please note that you do not need to accept the offer of admission.** You will be registered as a full-time student in the course RVST 999 and fees will be assessed. The fee payment deadline is **May 1, 2018**. Please refer to your Student Centre for your fee details. Registration in additional courses will be permitted if documentation is provided with the appropriate signatures. Regular course fees will be applied.

The Visiting Student Researcher program allows you the use of campus academic and recreational services. If you would like to buy a student UPASS (transit pass), please contact Joanna Wong. The cost of the UPASS is \$140 for the Winter term. All students require health insurance. If you do not have Health and Dental Insurance, it is available through the Graduate Student Association (<http://gsa.ucalgary.ca/health>).

The University of Calgary's Designated Learning Institution number is O18886830282 and your program is a Designated Learning Program and eligible to receive foreign nationals on a study permit. You will need a study permit in order to be a visiting student at the University of Calgary. You will need to show this to Arthur de Vera in the Department of Chemical and Petroleum Engineering on arrival to the university. All documents and information required to apply are available on the Citizenship and Immigration Canada (CIC) web site at <http://www.cic.gc.ca>. If you require support in study permit application process, please visit the University of Calgary's International Student Services web site at <https://www.ucalgary.ca/iss/> or email them at [international.advice@ucalgary.ca](mailto:international.advice@ucalgary.ca).

Follow the *"Instructions for Accessing the Student Centre"* on the next page to obtain an eID and use your Student Centre. For any other information about your program as a visiting student, contact Arthur de Vera in the Department of Chemical and Petroleum Engineering at (403) 220-4802.

# Apéndice D

## Glosario

- **Gravedad específica (SG)**: Es una comparación de la densidad de una sustancia con la densidad del agua. Esta definida como el peso unitario del material dividido por el peso unitario del agua destilada a 4 grados centígrados.
- **Ecuaciones de Navier-Stokes**: En física, las ecuaciones de Navier-Stokes, que llevan el nombre de Claude-Louis Navier y George Gabriel Stokes, describen el movimiento de las sustancias fluidas viscosas. Estas ecuaciones de equilibrio surgen de aplicar la segunda ley de Isaac Newton al movimiento fluido, junto con la suposición de que la tensión en el fluido es la suma de un término viscoso difusor (proporcional al gradiente de velocidad) y un término de presión, describiendo así el flujo viscoso [43]. Las ecuaciones de Navier-Stokes son útiles porque describen la física de muchos fenómenos de interés científico y de ingeniería. Se pueden usar para modelar el clima, las corrientes oceánicas, el flujo de agua en una tubería y el flujo de aire alrededor de un ala. Las ecuaciones de Navier-Stokes, en sus formas completas y simplificadas, ayudan con el diseño de aviones y automóviles, el estudio del flujo sanguíneo, el diseño de centrales eléctricas, el análisis de la contaminación y muchas otras cosas. Junto con las ecuaciones de Maxwell, se pueden usar para modelar y estudiar la magnetohidrodinámica.
- **Operador Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)**: BGK se refiere a un operador de colisión utilizado en la ecuación de Boltzmann y en el método Lattice Boltzmann, una técnica de dinámica de fluidos computacional [44]. Está dado por la siguiente fórmula:

$$\Omega_i = -(\tau^{-1}) * (n_i - n_i^{EQ}) \quad (D.1)$$

donde  $n_i^{EQ}$  es un valor de equilibrio local para la población de partículas en la dirección del enlace  $e_i$ . El término  $\tau$  es un tiempo de relajación, y está relacionado con la viscosidad.

# Bibliografía

- [1] Guozhong Wu, Lin He, and Daoyi Chen. Sorption and distribution of asphaltene, resin, aromatic and saturate fractions of heavy crude oil on quartz surface: molecular dynamic simulation. *Chemosphere*, 92(11):1465–1471, 2013.
- [2] James G Speight. *The chemistry and technology of petroleum*. CRC press, 2014.
- [3] Jorge Tadeo-Jalife. Tecnologías aplicables para la explotación de crudos pesados y extrapesados. *Instituto Politecnico Nacional*, 2011.
- [4] M Samir and H Hassan. Reservoir characterization of the issarann heavy oil field. *Petroleum Africa, Schlumberger*, 2010.
- [5] Joao Felix. El auge de los yacimientos carbonáticos. *Petroleum, Colombia*, 2010.
- [6] Mouna Essabbah, Samir Otmane, and Malik Mallem. 3d molecular modeling: from theory to applications. In *Human System Interactions, 2008 Conference on*, pages 350–355. IEEE, 2008.
- [7] William-A. Eaton and Victor Munoz. Impacto de las simulaciones atomísticas de dinámica molecular en el estudio del plegamiento de proteínas: la perspectiva del científico experimental. *Instituto Roche*, julio 2014.
- [8] Robert F Sekerka and Class Schedule. *Syllabus and Topics Statistical Mechanics*. Spring 2011., 2011.
- [9] Michael J Moran and Howard N Shapiro. *Fundamentos de termodinámica técnica*. Reverté, 2004.
- [10] Johnny Daniel Alfaro Pérez. Métodos de simulación molecular: una revisión de las herramientas más actuales. *Revista Ingeniería*, 24(2):117–127, 2014.
- [11] John E Lennard-Jones. Cohesion. *Proceedings of the Physical Society*, 43(5):461, 1931.
- [12] David J Griffiths. *Introduction to electrodynamics*, 2005.
- [13] R Leach Andrew. *Molecular modeling principles and applications. 2nd, editor.: Pearson Education Limited*, 2001.

- [14] Dennis C Rapaport and Dennis C Rapaport Rapaport. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge university press, 2004.
- [15] Philip M Morse. Diatomic molecules according to the wave mechanics. ii. vibrational levels. *Physical Review*, 34(1):57, 1929.
- [16] Berk Hess, Carsten Kutzner, David Van Der Spoel, and Erik Lindahl. GROMACS4 algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation. *Journal of chemical theory and computation*, 4(3):435–447, 2008.
- [17] George Kaminski and William L Jorgensen. Performance of the amber94, mmff94, and opl-aa force fields for modeling organic liquids. *The Journal of Physical Chemistry*, 100(46):18010–18013, 1996.
- [18] Michael P Allen and Dominic J Tildesley. *Computer simulation of liquids*. Oxford university press, 2017.
- [19] Devleena Shivakumar, Joshua Williams, Yujie Wu, Wolfgang Damm, John Shelley, and Woody Sherman. Prediction of absolute solvation free energies using molecular dynamics free energy perturbation and the opl force field. *Journal of chemical theory and computation*, 6(5):1509–1519, 2010.
- [20] William L Jorgensen, David S Maxwell, and Julian Tirado-Rives. Development and testing of the opl all-atom force field on conformational energetics and properties of organic liquids. *Journal of the American Chemical Society*, 118(45):11225–11236, 1996.
- [21] Wilfred F van Gunsteren and Herman JC Berendsen. Computer simulation of molecular dynamics: Methodology, applications, and perspectives in chemistry. *Angewandte Chemie International Edition in English*, 29(9):992–1023, 1990.
- [22] David Chandler. Introduction to modern statistical mechanics. *Introduction to Modern Statistical Mechanics, by David Chandler, pp. 288. Foreword by David Chandler. Oxford University Press, Sep 1987. ISBN-10: 0195042778. ISBN-13: 9780195042771, page 288, 1987.*
- [23] Ricardo Rodríguez Schmidt et al. *Simulación de propiedades en disolución de polímeros*. PhD thesis, Universidad de Murcia, 2012.
- [24] Frank Eisenhaber, Philip Lijnzaad, Patrick Argos, Chris Sander, and Michael Scharf. The double cubic lattice method: efficient approaches to numerical integration of surface area and volume and to dot surface contouring of molecular assemblies. *Journal of Computational Chemistry*, 16(3):273–284, 1995.
- [25] Vladimir N Maiorov and Gordon M Crippen. Significance of root-mean-square deviation in comparing three-dimensional structures of globular proteins. *Elsevier*, 1994.

- [26] William D Callister and David G Rethwisch. *Materials science and engineering*, volume 5. John Wiley and Sons NY, 2011.
- [27] Guang-Jun Guo, Yi-Gang Zhang, Keith Refson, and Ya-Juan Zhao. Viscosity and stress autocorrelation function in supercooled water: a molecular dynamics study. *Molecular Physics*, 100(16):2617–2627, 2002.
- [28] Berk Hess. Determining the shear viscosity of model liquids from molecular dynamics simulations. *The Journal of chemical physics*, 116(1):209–217, 2002.
- [29] Romanova U., Piwowar M., and Ma T. An overview of the low and high temperature water-oil relative permeability for oil sands from different formations in western canada. *In International Symposium of the Society of Core Analysts*, pages 2014–066, September 2014.
- [30] M. A. Motahhari, H. and Satyro, S. D. Taylor, and H. W. Yarranton. Extension of the expanded fluid viscosity model to characterized oils. *Energy and Fuels*, 27(4):1881–1898, 2013.
- [31] F. J. Pacheco-Roman and S. H. Hejazi. Estimation of solubility and diffusivity of gases in heavy oils by use of late-time pressure-decay data: an analytical/graphical approach. *SPE Journal*, 20(04):717–728, 2015.
- [32] J. P. Gallo-Molina, N. Ratkovich, , and O. Alvarez. Multiscale analysis of water-in-oil emulsions: A computational fluid dynamics approach. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 56(27):7757–7767, 2017.
- [33] B. Chen, M. G. Martin, and J. I. Siepmann. Thermodynamic properties of the williams, opls-aa, and mmff94 all-atom force fields for normal alkanes. *The Journal of Physical Chemistry B*, 102(14):2578–2586, 1998.
- [34] G. A. Kaminski, R. A. Friesner, J. Tirado-Rives, and W. L. Jorgensen. Evaluation and reparametrization of the opls-aa force field for proteins via comparison with accurate quantum chemical calculations on peptides. *The Journal of Physical Chemistry B*, 105(28):6474–6487, 2001.
- [35] G. Kaminski, E. M. Duffy, T. Matsui, and W. L. Jorgensen. Free energies of hydration and pure liquid properties of hydrocarbons from the opls all-atom model. *The Journal of Physical Chemistry B*, 98(49):13077–13082, 1994.
- [36] R. B. Hermann. Calculation of hydrophobic interactions from molecular dynamics, surface areas, and experimental hydrocarbon solubilities. *Journal of computational chemistry*, 14(6):741–750, 1993.
- [37] P. Ungerer, J. Collell, and M. Yiannourakou. Molecular modeling of the volumetric and thermodynamic properties of kerogen: Influence of organic type and maturity. *Energy and Fuels*, 29(1):91–105, 2014.

- [38] S. W. Siu, K. Pluhackova, and R. A. Bockmann. Optimization of the opls-aa force field for long hydrocarbons. *Journal of chemical theory and computation*, 8(14):1459–1470, 2012.
- [39] J. I. Siepmann, S. Karaborni, and B. Smit. Simulating the critical behaviour of complex fluids. *Nature*, 365(6444):330, 1993.
- [40] R. D. and Thirumalai D. Molecular dynamics simulations of end-to-end contact formation in hydrocarbon chains in water and aqueous urea solution. *Journal of the American Chemical Society*, 125(7):1950–1957, 2003.
- [41] Shiyi Chen and Gary D Doolen. Lattice boltzmann method for fluid flows. *Annual review of fluid mechanics*, 30(1):329–364, 1998.
- [42] MC Sukop. Dt thorne, jr. lattice boltzmann modeling lattice boltzmann modeling. 2006.
- [43] Jonas T Holdeman and Jin Whan Kim. Computation of incompressible thermal flows using hermite finite elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(49-52):3297–3304, 2010.
- [44] Prabhu Lal Bhatnagar, Eugene P Gross, and Max Krook. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical review*, 94(3):511, 1954.