Enzyme-Like Polyene Cyclizations Catalyzed by Dynamic, Self-Assembled, Supramolecular Fluoro Alcohol-Amine Clusters

Andreas M. Arnold,[1,2] Philipp Dullinger,[3] Aniruddha Biswas,[2] Christian Jandl,[4] Dominik Horinek[3] and Tanja Gulder[1,2,4*]

[1]Biomimetic Catalysis, Department of Chemistry, Technical University Munich, Lichtenbergstraße 4, 85747 Garching, Germany
[2]Chair of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry and Mineralogy, Leipzig University, Johannisallee 29, 04103 Leipzig, Germany[3]Institute of Physical and Theoretical Chemistry, University of Regensburg, 93040 Regensburg, Germany
[4]Catalysis Research Center, Technical University Munich, Ernst-Otto-Fischer-Straße 1, 85747 Garching, Germany

SUPPLEMENTARY DATA 3: SIMULATION PARAMETERS

Forcefield parameters:

General information:

```
[ defaults ]
; nbfunc        comb-rule       gen-pairs       fudgeLJ fudgeQQ
1               2               yes             0.5     0.8333
```

Atom types: GAFF parameters

GerBn.itp

```
[ molecule type ]
;name            nrexcl
 HGB             3

[ atoms ]
    1   ca    1   HGB     C    1    -0.186730     12.01000 ; qtot 0.000
    2   ca    1   HGB    C1    2     0.183336     12.01000 ; qtot 0.000
    3   ca    1   HGB    C2    3    -0.196350     12.01000 ; qtot 0.000
    4   ca    1   HGB    C3    4    -0.104815     12.01000 ; qtot 0.000
    5   ca    1   HGB    C4    5    -0.150817     12.01000 ; qtot 0.000
    6   ca    1   HGB    C5    6    -0.114855     12.01000 ; qtot 0.000
    7   c3    1   HGB    C6    7    -0.446041     12.01000 ; qtot 0.000
    8   c3    1   HGB    C7    8     0.558880     12.01000 ; qtot 0.000
    9   c2    1   HGB    C8    9    -0.576308     12.01000 ; qtot 0.000
   10   c2    1   HGB    C9   10     0.242090     12.01000 ; qtot 0.000
   11   c3    1   HGB   C10   11    -0.366397     12.01000 ; qtot 0.000
   12   c3    1   HGB   C11   12     0.434900     12.01000 ; qtot 0.000
   13   c2    1   HGB   C12   13    -0.611442     12.01000 ; qtot 0.000
   14   c2    1   HGB   C13   14     0.291109     12.01000 ; qtot 0.000
   15   c3    1   HGB   C14   15    -0.336390     12.01000 ; qtot 0.000
   16   c3    1   HGB   C15   16    -0.246001     12.01000 ; qtot 0.000
   17   c3    1   HGB   C16   17    -0.269185     12.01000 ; qtot 0.000
   18   ha    1   HGB     H   18     0.098879      1.00800 ; qtot 0.000
   19   ha    1   HGB    H1   19     0.124961      1.00800 ; qtot 0.000
   20   ha    1   HGB    H2   20     0.117700      1.00800 ; qtot 0.000
   21   ha    1   HGB    H3   21     0.121519      1.00800 ; qtot 0.000
   22   ha    1   HGB    H4   22     0.122887      1.00800 ; qtot 0.000
   23   hc    1   HGB    H5   23     0.122172      1.00800 ; qtot 0.000
   24   hc    1   HGB    H6   24     0.122172      1.00800 ; qtot 0.000
   25   hc    1   HGB    H7   25    -0.056683      1.00800 ; qtot 0.000
   26   hc    1   HGB    H8   26    -0.056683      1.00800 ; qtot 0.000
   27   ha    1   HGB    H9   27     0.132368      1.00800 ; qtot 0.000
   28   hc    1   HGB   H10   28     0.105259      1.00800 ; qtot 0.000
   29   hc    1   HGB   H11   29     0.105259      1.00800 ; qtot 0.000
   30   hc    1   HGB   H12   30    -0.022929      1.00800 ; qtot 0.000
   31   hc    1   HGB   H13   31    -0.022929      1.00800 ; qtot 0.000
   32   ha    1   HGB   H14   32     0.183628      1.00800 ; qtot 0.000
   33   hc    1   HGB   H15   33     0.091792      1.00800 ; qtot 0.000
   34   hc    1   HGB   H16   34     0.091792      1.00800 ; qtot 0.000
   35   hc    1   HGB   H17   35     0.091792      1.00800 ; qtot 0.000
```

```
  36  hc    1  HGB   H18   36    0.067073     1.00800 ; qtot 0.000
  37  hc    1  HGB   H19   37    0.067073     1.00800 ; qtot 0.000
  38  hc    1  HGB   H20   38    0.067073     1.00800 ; qtot 0.000
  39  hc    1  HGB   H21   39    0.073614     1.00800 ; qtot 0.000
  40  hc    1  HGB   H22   40    0.073614     1.00800 ; qtot 0.000
  41  hc    1  HGB   H23   41    0.073614     1.00800 ; qtot 0.000

[ bonds ]
;  ai    aj funct   r             k
   1     2   1   1.3984e-01   3.8585e+05 ;     C - C1
   1     6   1   1.3984e-01   3.8585e+05 ;     C - C5
   1    18   1    1.0860e-01    2.8937e+05 ;     C - H
   2     3   1   1.3984e-01   3.8585e+05 ;    C1 - C2
   2     7   1   1.5156e-01   2.6861e+05 ;    C1 - C6
   3     4   1   1.3984e-01   3.8585e+05 ;    C2 - C3
   3    19   1    1.0860e-01    2.8937e+05 ;    C2 - H1
   4     5   1   1.3984e-01   3.8585e+05 ;    C3 - C4
   4    20   1    1.0860e-01    2.8937e+05 ;    C3 - H2
   5     6   1   1.3984e-01   3.8585e+05 ;    C4 - C5
   5    21   1    1.0860e-01    2.8937e+05 ;    C4 - H3
   6    22   1    1.0860e-01    2.8937e+05 ;    C5 - H4
   7     8   1   1.5375e-01   2.5179e+05 ;    C6 - C7
   7    23   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;    C6 - H5
   7    24   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;    C6 - H6
   8     9   1   1.5095e-01   2.7347e+05 ;    C7 - C8
   8    25   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;    C7 - H7
   8    26   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;    C7 - H8
   9    10   1    1.3343e-01    4.7647e+05 ;    C8 - C9
   9    27   1    1.0879e-01    2.8711e+05 ;    C8 - H9
  10    11   1    1.5095e-01    2.7347e+05 ;    C9 - C10
  10    17   1    1.5095e-01    2.7347e+05 ;    C9 - C16
  11    12   1    1.5375e-01    2.5179e+05 ;   C10 - C11
  11    28   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C10 - H10
  11    29   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C10 - H11
  12    13   1    1.5095e-01    2.7347e+05 ;   C11 - C12
  12    30   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C11 - H12
  12    31   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C11 - H13
  13    14   1    1.3343e-01    4.7647e+05 ;   C12 - C13
  13    32   1    1.0879e-01    2.8711e+05 ;   C12 - H14
  14    15   1    1.5095e-01    2.7347e+05 ;   C13 - C14
  14    16   1    1.5095e-01    2.7347e+05 ;   C13 - C15
  15    33   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C14 - H15
  15    34   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C14 - H16
  15    35   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C14 - H17
  16    36   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C15 - H18
  16    37   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C15 - H19
  16    38   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C15 - H20
  17    39   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C16 - H21
  17    40   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C16 - H22
  17    41   1    1.0969e-01    2.7665e+05 ;   C16 - H23
```

```
[ pairs ]
;  ai    aj   funct
    1     4     1 ;     C - C3
    1     8     1 ;     C - C7
    1    19     1 ;     C - H1
    1    21     1 ;     C - H3
    1    23     1 ;     C - H5
    1    24     1 ;     C - H6
    2     5     1 ;    C1 - C4
    2     9     1 ;    C1 - C8
    2    20     1 ;    C1 - H2
    2    22     1 ;    C1 - H4
    2    25     1;     C1 - H7
    2    26     1;     C1 - H8
    3     8     1 ;    C2 - C7
    3    21     1 ;    C2 - H3
    3    23     1 ;    C2 - H5
    3    24     1 ;    C2 - H6
    4     7     1 ;    C3 - C6
    4    22     1 ;    C3 - H4
    5    19     1 ;    C4 - H1
    6     3     1 ;    C5 - C2
    6     7     1 ;    C5 - C6
    6    20     1 ;    C5 - H2
    7    10     1 ;    C6 - C9
    7    19     1 ;    C6 - H1
    7    27     1 ;    C6 - H9
    8    11     1 ;    C7 - C10
    8    17     1 ;    C7 - C16
    9    12     1 ;    C8 - C11
    9    23     1 ;    C8 - H5
    9    24     1 ;    C8 - H6
    9    28     1 ;    C8 - H10
    9    29     1 ;    C8 - H11
    9    39     1 ;    C8 - H21
    9    40     1 ;    C8 - H22
    9    41     1 ;    C8 - H23
   10    13     1 ;    C9 - C12
   10    25     1;     C9 - H7
   10    26     1 ;    C9 - H8
   10    30     1 ;    C9 - H12
   10    31     1 ;    C9 - H13
   11    14     1 ;   C10 - C13
   11    27     1 ;   C10 - H9
   11    32     1 ;   C10 - H14
   11    39     1 ;   C10 - H21
   11    40     1 ;   C10 - H22
   11    41     1 ;   C10 - H23
   12    15     1 ;   C11 - C14
   12    16     1 ;   C11 - C15
   12    17     1 ;   C11 - C16
   13    28     1 ;   C12 - H10
   13    29     1 ;   C12 - H11
```

```
  13    33     1 ;   C12 - H15
  13    34     1 ;   C12 - H16
  13    35     1 ;   C12 - H17
  13    36     1 ;   C12 - H18
  13    37     1 ;   C12 - H19
  13    38     1 ;   C12 - H20
  14    30     1 ;   C13 - H12
  14    31     1 ;   C13 - H13
  15    32     1 ;   C14 - H14
  15    36     1 ;   C14 - H18
  15    37     1 ;   C14 - H19
  15    38     1 ;   C14 - H20
  16    32     1 ;   C15 - H14
  16    33     1 ;   C15 - H15
  16    34     1 ;   C15 - H16
  16    35     1 ;   C15 - H17
  17    27     1 ;   C16 - H9
  17    28     1 ;   C16 - H10
  17    29     1 ;   C16 - H11
  18     3     1 ;    H - C2
  18     5     1 ;    H - C4
  18     7     1 ;    H - C6
  18    22     1 ;     H - H4
  19    20     1 ;    H1 - H2
  20    21     1 ;    H2 - H3
  21    22     1 ;    H3 - H4
  23    25     1 ;    H5 - H7
  23    26     1 ;    H5 - H8
  24    25     1 ;    H6 - H7
  24    26     1 ;    H6 - H8
  25    27     1 ;    H7 - H9
  26    27     1 ;    H8 - H9
  28    30     1 ;   H10 - H12
  28    31     1 ;   H10 - H13
  29    30     1 ;   H11 - H12
  29    31     1 ;   H11 - H13
  30    32     1 ;   H12 - H14
  31    32     1 ;   H13 - H14

[ angles ]
;  ai    aj    ak    funct   theta       cth
   1     2     3     1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;     C - C1    - C2
   1     2     7     1   1.2077e+02   5.3137e+02 ;     C - C1    - C6
   1     6     5     1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;     C - C5    - C4
   1     6    22     1    1.1988e+02   4.0334e+02 ;     C - C5    - H4
   2     1     6     1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;    C1 - C     - C5
   2     1    18     1    1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C1 - C     - H
   2     3     4     1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;    C1 - C2    - C3
   2     3    19     1    1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C1 - C2    - H1
   2     7     8     1   1.1207e+02   5.2802e+02 ;    C1 - C6    - C7
   2     7    23     1    1.1047e+02   3.9162e+02 ;    C1 - C6    - H5
   2     7    24     1    1.1047e+02   3.9162e+02 ;    C1 - C6    - H6
   3     2     7     1   1.2077e+02   5.3137e+02 ;    C2 - C1    - C6
```

```
 3    4    5    1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;   C2 - C3    - C4
 3    4   20    1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;   C2 - C3    - H2
 4    3   19    1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;   C3 - C2    - H1
 4    5    6    1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;   C3 - C4    - C5
 4    5   21    1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;   C3 - C4    - H3
 5    4   20    1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;   C4 - C3    - H2
 5    6   22    1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;   C4 - C5    - H4
 6    1   18    1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;   C5 - C     - H
 6    5   21    1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;   C5 - C4    - H3
 7    8    9    1   1.1156e+02   5.3053e+02 ;   C6 - C7    - C8
 7    8   25    1   1.0980e+02   3.8744e+02 ;   C6 - C7    - H7
 7    8   26    1   1.0980e+02   3.8744e+02 ;   C6 - C7    - H8
 8    7   23    1   1.0980e+02   3.8744e+02 ;   C7 - C6    - H5
 8    7   24    1   1.0980e+02   3.8744e+02 ;   C7 - C6    - H6
 8    9   10    1   1.2363e+02   5.3639e+02 ;   C7 - C8    - C9
 8    9   27    1   1.1568e+02   3.8409e+02 ;   C7 - C8    - H9
 9    8   25    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C8 - C7    - H7
 9    8   26    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C8 - C7    - H8
 9   10   11    1   1.2363e+02   5.3639e+02 ;   C8 - C9    - C10
 9   10   17    1   1.2363e+02   5.3639e+02 ;   C8 - C9    - C16
10    9   27    1   1.2043e+02   4.1756e+02 ;   C9 - C8    - H9
10   11   12    1   1.1156e+02   5.3053e+02 ;   C9 - C10   - C11
10   11   28    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C9 - C10   - H10
10   11   29    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C9 - C10   - H11
10   17   39    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C9 - C16   - H21
10   17   40    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C9 - C16   - H22
10   17   41    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C9 - C16   - H23
11   10   17    1   1.1565e+02   5.2635e+02 ;   C10 - C9   - C16
11   12   13    1   1.1156e+02   5.3053e+02 ;   C10 - C11  - C12
11   12   30    1   1.0980e+02   3.8744e+02 ;   C10 - C11  - H12
11   12   31    1   1.0980e+02   3.8744e+02 ;   C10 - C11  - H13
12   11   28    1   1.0980e+02   3.8744e+02 ;   C11 - C10  - H10
12   11   29    1   1.0980e+02   3.8744e+02 ;   C11 - C10  - H11
12   13   14    1   1.2363e+02   5.3639e+02 ;   C11 - C12  - C13
12   13   32    1   1.1568e+02   3.8409e+02 ;   C11 - C12  - H14
13   12   30    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C12 - C11  - H12
13   12   31    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C12 - C11  - H13
13   14   15    1   1.2363e+02   5.3639e+02 ;   C12 - C13  - C14
13   14   16    1   1.2363e+02   5.3639e+02 ;   C12 - C13  - C15
14   13   32    1   1.2043e+02   4.1756e+02 ;   C13 - C12  - H14
14   15   33    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C13 - C14  - H15
14   15   34    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C13 - C14  - H16
14   15   35    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C13 - C14  - H17
14   16   36    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C13 - C15  - H18
14   16   37    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C13 - C15  - H19
14   16   38    1   1.1036e+02   3.9330e+02 ;   C13 - C15  - H20
15   14   16    1   1.1565e+02   5.2635e+02 ;   C14 - C13  - C15
23    7   24    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H5 - C6    - H6
25    8   26    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H7 - C7    - H8
28   11   29    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H10 - C10  - H11
30   12   31    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H12 - C11  - H13
33   15   34    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H15 - C14  - H16
33   15   35    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H15 - C14  - H17
```

```
  34   15   35    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H16 - C14   - H17
  36   16   37    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H18 - C15   - H19
  36   16   38    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H18 - C15   - H20
  37   16   38    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H19 - C15   - H20
  39   17   40    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H21 - C16   - H22
  39   17   41    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H21 - C16   - H23
  40   17   41    1   1.0758e+02   3.2970e+02 ;   H22 - C16   - H23

[ dihedrals ] ; propers
; treated as RBs in GROMACS to use combine multiple AMBER torsions per quartet
;   i    j    k    l  func    C0        C1        C2        C3        C4        C5
   1    2    3    4     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C-   C1-
C2-   C3
   1    2    3   19     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C-   C1-
C2-   H1
   1    2    7    8     3    0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C-   C1-   C6-
C7
   1    2    7   23     3    0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C-   C1-   C6-
H5
   1    2    7   24     3    0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C-   C1-   C6-
H6
   1    6    5    4     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C-   C5-
C4-   C3
   1    6    5   21     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C-   C5-
C4-   H3
   2    1    6    5     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C1-   C-
C5-   C4
   2    1    6   22     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C1-   C-
C5-   H4
   2    3    4    5     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C1-   C2-
C3-   C4
   2    3    4   20     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C1-   C2-
C3-   H2
   2    7    8    9     3    0.65084   1.95253   0.00000  -2.60338   0.00000   0.00000 ;    C1-   C6-
C7-   C8
   2    7    8   25     3    0.65084   1.95253   0.00000  -2.60338   0.00000   0.00000 ;    C1-   C6-
C7-   H7
   2    7    8   26     3    0.65084   1.95253   0.00000  -2.60338   0.00000   0.00000 ;    C1-   C6-
C7-   H8
   3    2    7    8     3    0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C2-   C1-   C6-
C7
   3    2    7   23     3    0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C2-   C1-
C6-   H5
   3    2    7   24     3    0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C2-   C1-
C6-   H6
   3    4    5    6     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C2-   C3-
C4-   C5
   3    4    5   21     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C2-   C3-
C4-   H3
   4    3    2    7     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C3-   C2-
C1-   C6
   4    5    6   22     3   30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    C3-   C4-
C5-   H4
```

5 4 3 19 3 30.33400 0.00000 -30.33400 0.00000 0.00000 0.00000 ; C4- C3-
C2- H1
6 1 2 3 3 30.33400 0.00000 -30.33400 0.00000 0.00000 0.00000 ; C5- C-
C1- C2
6 1 2 7 3 30.33400 0.00000 -30.33400 0.00000 0.00000 0.00000 ; C5- C-
C1- C6
6 5 4 20 3 30.33400 0.00000 -30.33400 0.00000 0.00000 0.00000 ; C5- C4-
C3- H2
7 2 3 19 3 30.33400 0.00000 -30.33400 0.00000 0.00000 0.00000 ; C6- C1-
C2- H1
7 8 9 10 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C6- C7-
C8- C9
7 8 9 27 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C6- C7-
C8- H9
8 9 10 11 3 63.59680 7.94960 -55.64720 0.00000 0.00000 0.00000 ; C7- C8-
C9- C10
8 9 10 17 3 63.59680 7.94960 -55.64720 0.00000 0.00000 0.00000 ; C7- C8-
C9- C16
9 8 7 23 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C8- C7-
C6- H5
9 8 7 24 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C8- C7-
C6- H6
9 10 11 12 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C8- C9-
C10- C11
9 10 11 28 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C8- C9-
C10- H10
9 10 11 29 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C8- C9-
C10- H11
9 10 17 39 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C8- C9-
C16- H21
9 10 17 40 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C8- C9-
C16- H22
9 10 17 41 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C8- C9-
C16- H23
10 9 8 25 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C9- C8-
C7- H7
10 9 8 26 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C9- C8-
C7- H8
10 11 12 13 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C9- C10-
C11- C12
10 11 12 30 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C9- C10-
C11- H12
10 11 12 31 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C9- C10-
C11- H13
11 10 9 27 3 55.64720 0.00000 -55.64720 0.00000 0.00000 0.00000 ; C10- C9-
C8- H9
11 10 17 39 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C10- C9-
C16- H21
11 10 17 40 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C10- C9-
C16- H22
11 10 17 41 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C10- C9-
C16- H23

11 12 13 14 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C10- C11- C12- C13
11 12 13 32 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C10- C11- C12- H14
12 11 10 17 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C11- C10- C9- C16
12 13 14 15 3 63.59680 7.94960 -55.64720 0.00000 0.00000 0.00000 ; C11- C12- C13- C14
12 13 14 16 3 63.59680 7.94960 -55.64720 0.00000 0.00000 0.00000 ; C11- C12- C13- C15
13 12 11 28 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C12- C11- C10- H10
13 12 11 29 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C12- C11- C10- H11
13 14 15 33 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C12- C13- C14- H15
13 14 15 34 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C12- C13- C14- H16
13 14 15 35 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C12- C13- C14- H17
13 14 16 36 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C12- C13- C15- H18
13 14 16 37 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C12- C13- C15- H19
13 14 16 38 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C12- C13- C15- H20
14 13 12 30 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C13- C12- C11- H12
14 13 12 31 3 6.40152 -9.58136 0.00000 6.35968 0.00000 0.00000 ; C13- C12- C11- H13
15 14 13 32 3 55.64720 0.00000 -55.64720 0.00000 0.00000 0.00000 ; C14- C13- C12- H14
15 14 16 36 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C14- C13- C15- H18
15 14 16 37 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C14- C13- C15- H19
15 14 16 38 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C14- C13- C15- H20
16 14 13 32 3 55.64720 0.00000 -55.64720 0.00000 0.00000 0.00000 ; C15- C13- C12- H14
16 14 15 33 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C15- C13- C14- H15
16 14 15 34 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C15- C13- C14- H16
16 14 15 35 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C15- C13- C14- H17
17 10 9 27 3 55.64720 0.00000 -55.64720 0.00000 0.00000 0.00000 ; C16- C9- C8- H9
17 10 11 28 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C16- C9- C10- H10
17 10 11 29 3 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 ; C16- C9- C10- H11

```
  18    1    2    3    3  30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    H-   C-
C1-   C2
  18    1    2    7    3  30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    H-   C-
C1-   C6
  18    1    6    5    3  30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    H-   C-
C5-   C4
  18    1    6   22    3  30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;    H-   C-
C5-   H4
  19    3    4   20    3  30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;   H1-   C2-
C3-   H2
  20    4    5   21    3  30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;   H2-   C3-
C4-   H3
  21    5    6   22    3  30.33400   0.00000  -30.33400   0.00000   0.00000   0.00000 ;   H3-   C4-
C5-   H4
  23    7    8   25    3   0.62760   1.88280   0.00000  -2.51040   0.00000   0.00000 ;   H5-   C6-
C7-   H7
  23    7    8   26    3   0.62760   1.88280   0.00000  -2.51040   0.00000   0.00000 ;   H5-   C6-
C7-   H8
  24    7    8   25    3   0.62760   1.88280   0.00000  -2.51040   0.00000   0.00000 ;   H6-   C6-
C7-   H7
  24    7    8   26    3   0.62760   1.88280   0.00000  -2.51040   0.00000   0.00000 ;   H6-   C6-
C7-   H8
  25    8    9   27    3   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000 ;   H7-   C7-
C8-   H9
  26    8    9   27    3   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000 ;   H8-   C7-
C8-   H9
  28   11   12   30    3   0.62760   1.88280   0.00000  -2.51040   0.00000   0.00000 ;  H10-  C10-
C11-  H12
  28   11   12   31    3   0.62760   1.88280   0.00000  -2.51040   0.00000   0.00000 ;  H10-  C10-
C11-  H13
  29   11   12   30    3   0.62760   1.88280   0.00000  -2.51040   0.00000   0.00000 ;  H11-  C10-
C11-  H12
  29   11   12   31    3   0.62760   1.88280   0.00000  -2.51040   0.00000   0.00000 ;  H11-  C10-
C11-  H13
  30   12   13   32    3   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000 ;  H12-  C11-
C12-  H14
  31   12   13   32    3   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000 ;  H13-  C11-
C12-  H14

[ dihedrals ] ; impropers
; treated as propers in GROMACS to use correct AMBER analytical function
;   i    j    k    l  func   phase     kd      pn
    1    3    2    7     1  180.00   4.60240   2 ;    C-   C2-   C1-   C6
    1    5    6   22     1  180.00   4.60240   2 ;    C-   C4-   C5-   H4
    2    4    3   19     1  180.00   4.60240   2 ;   C1-   C3-   C2-   H1
    3    5    4   20     1  180.00   4.60240   2 ;   C2-   C4-   C3-   H2
    4    6    5   21     1  180.00   4.60240   2 ;   C3-   C5-   C4-   H3
    9   11   10   17     1  180.00   4.60240   2 ;   C8-  C10-   C9-  C16
   10    8    9   27     1  180.00   4.60240   2 ;   C9-   C7-   C8-   H9
   13   15   14   16     1  180.00   4.60240   2 ;  C12-  C14-  C13-  C15
   14   12   13   32     1  180.00   4.60240   2 ;  C13-  C11-  C12-  H14
   18    1    6    2     1  180.00   4.60240   2 ;    H-   C-   C5-   C1
```

PFTB.itp

```
[ molecule type ]
;name            nrexcl
 SOL             3

[ atoms ]
    1   c3     1   SOL     C    1     -0.231634     12.01000 ; qtot 0.000
    2   c3     1   SOL    C1    2      0.561837     12.01000 ; qtot 0.000
    3   c3     1   SOL    C2    3      0.552406     12.01000 ; qtot 0.000
    4   oh     1   SOL     O    4     -0.455242     16.00000 ; qtot 0.000
    5   c3     1   SOL    C3    5      0.626784     12.01000 ; qtot 0.000
    6   f      1   SOL     F    6     -0.176568     19.00000 ; qtot 0.000
    7   f      1   SOL    F1    7     -0.158578     19.00000 ; qtot 0.000
    8   f      1   SOL    F2    8     -0.153817     19.00000 ; qtot 0.000
    9   f      1   SOL    F3    9     -0.173911     19.00000 ; qtot 0.000
   10   f      1   SOL    F4   10     -0.151273     19.00000 ; qtot 0.000
   11   f      1   SOL    F5   11     -0.157313     19.00000 ; qtot 0.000
   12   f      1   SOL    F6   12     -0.194871     19.00000 ; qtot 0.000
   13   f      1   SOL    F7   13     -0.155073     19.00000 ; qtot 0.000
   14   f      1   SOL    F8   14     -0.155624     19.00000 ; qtot 0.000
   15   ho     1   SOL     H   15      0.422876      1.00800 ; qtot 0.000

[ bonds ]

;  ai    aj funct   r             k
    1     2   1    1.5375e-01    2.5179e+05 ;     C - C1
    1     3   1    1.5375e-01    2.5179e+05 ;     C - C2
    1     4   1    1.4233e-01    2.6501e+05 ;     C - O
    1     5   1    1.5375e-01    2.5179e+05 ;     C - C3
    2     6   1    1.3497e-01    2.9865e+05 ;    C1 - F
    2     7   1    1.3497e-01    2.9865e+05 ;    C1 - F1
    2     8   1    1.3497e-01    2.9865e+05 ;    C1 - F2
    3     9   1    1.3497e-01    2.9865e+05 ;    C2 - F3
    3    10   1    1.3497e-01    2.9865e+05 ;    C2 - F4
    3    11   1    1.3497e-01    2.9865e+05 ;    C2 - F5
    4    15   1    9.7300e-02    3.1079e+05 ;     O - H
    5    12   1    1.3497e-01    2.9865e+05 ;    C3 - F6
    5    13   1    1.3497e-01    2.9865e+05 ;    C3 - F7
    5    14   1    1.3497e-01    2.9865e+05 ;    C3 - F8

[ pairs ]

;  ai    aj    funct
    2     9     1 ;    C1 - F3
    2    10     1 ;    C1 - F4
    2    11     1 ;    C1 - F5
    2    12     1 ;    C1 - F6
    2    13     1 ;    C1 - F7
    2    14     1 ;    C1 - F8
    2    15     1 ;    C1 - H
    3     6     1 ;    C2 - F
```

```
   3     7     1 ;    C2 - F1
   3     8     1 ;    C2 - F2
   3    12     1 ;    C2 - F6
   3    13     1 ;    C2 - F7
   3    14     1 ;    C2 - F8
   3    15     1 ;    C2 - H
   4     6     1 ;     O - F
   4     7     1 ;     O - F1
   4     8     1 ;     O - F2
   4     9     1 ;     O - F3
   4    10     1 ;     O - F4
   4    11     1 ;     O - F5
   4    12     1 ;     O - F6
   4    13     1 ;     O - F7
   4    14     1 ;     O - F8
   5     6     1 ;    C3 - F
   5     7     1 ;    C3 - F1
   5     8     1 ;    C3 - F2
   5     9     1 ;    C3 - F3
   5    10     1 ;    C3 - F4
   5    11     1 ;    C3 - F5
   5    15     1 ;    C3 - H

[ angles ]

;  ai    aj    ak    funct   theta       cth
   1     2     6     1   1.0924e+02   5.5312e+02 ;     C - C1    - F
   1     2     7     1   1.0924e+02   5.5312e+02 ;     C - C1    - F1
   1     2     8     1   1.0924e+02   5.5312e+02 ;     C - C1    - F2
   1     3     9     1   1.0924e+02   5.5312e+02 ;     C - C2    - F3
   1     3    10     1    1.0924e+02   5.5312e+02 ;     C - C2     - F4
   1     3    11     1    1.0924e+02   5.5312e+02 ;     C - C2     - F5
   1     4    15     1    1.0726e+02   3.9664e+02 ;     C - O     - H
   1     5    12     1    1.0924e+02   5.5312e+02 ;     C - C3     - F6
   1     5    13     1    1.0924e+02   5.5312e+02 ;     C - C3     - F7
   1     5    14     1    1.0924e+02   5.5312e+02 ;     C - C3     - F8
   2     1     3     1   1.1151e+02   5.2635e+02 ;    C1 - C     - C2
   2     1     4     1   1.1019e+02   5.6484e+02 ;    C1 - C     - O
   2     1     5     1   1.1151e+02   5.2635e+02 ;    C1 - C     - C3
   3     1     4     1   1.1019e+02   5.6484e+02 ;    C2 - C     - O
   3     1     5     1   1.1151e+02   5.2635e+02 ;    C2 - C     - C3
   4     1     5     1   1.1019e+02   5.6484e+02 ;     O - C     - C3
   6     2     7     1   1.0736e+02   5.9329e+02 ;     F - C1    - F1
   6     2     8     1   1.0736e+02   5.9329e+02 ;     F - C1    - F2
   7     2     8     1   1.0736e+02   5.9329e+02 ;    F1 - C1    - F2
   9     3    10     1    1.0736e+02   5.9329e+02 ;    F3 - C2    - F4
   9     3    11     1    1.0736e+02   5.9329e+02 ;    F3 - C2    - F5
  10     3    11     1    1.0736e+02   5.9329e+02 ;    F4 - C2    - F5
  12     5    13     1    1.0736e+02   5.9329e+02 ;    F6 - C3    - F7
  12     5    14     1    1.0736e+02   5.9329e+02 ;    F6 - C3    - F8
  13     5    14     1    1.0736e+02   5.9329e+02 ;    F7 - C3    - F8

[ dihedrals ] ; propers
```

; treated as RBs in GROMACS to use combine multiple AMBER torsions per quartet
; i j k l func C0 C1 C2 C3 C4 C5
2 1 3 9 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C1- C- C2- F3
2 1 3 10 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C1- C- C2- F4
2 1 3 11 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C1- C- C2- F5
2 1 4 15 3 1.71544 0.96232 0.00000 -2.67776 0.00000 0.00000 ; C1- C- O- H
2 1 5 12 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C1- C- C3- F6
2 1 5 13 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C1- C- C3- F7
2 1 5 14 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C1- C- C3- F8
3 1 2 6 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C2- C- C1- F
3 1 2 7 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C2- C- C1- F1
3 1 2 8 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C2- C- C1- F2
3 1 4 15 3 1.71544 0.96232 0.00000 -2.67776 0.00000 0.00000 ; C2- C- O- H
3 1 5 12 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C2- C- C3- F6
3 1 5 13 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C2- C- C3- F7
3 1 5 14 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C2- C- C3- F8
4 1 2 6 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; O- C- C1- F
4 1 2 7 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; O- C- C1- F1
4 1 2 8 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; O- C- C1- F2
4 1 3 9 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; O- C- C2- F3
4 1 3 10 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; O- C- C2- F4
4 1 3 11 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; O- C- C2- F5
4 1 5 12 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; O- C- C3- F6
4 1 5 13 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; O- C- C3- F7
4 1 5 14 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; O- C- C3- F8
5 1 2 6 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C3- C- C1- F
5 1 2 7 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C3- C- C1- F1

5 1 2 8 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C3- C- C1- F2
5 1 3 9 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C3- C- C2- F3
5 1 3 10 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C3- C- C2- F4
5 1 3 11 3 0.65084 1.95253 0.00000 -2.60338 0.00000 0.00000 ; C3- C- C2- F5
5 1 4 15 3 1.71544 0.96232 0.00000 -2.67776 0.00000 0.00000 ; C3- C- O- H

Py.itp

```
[ molecule type ]
;name          nrexcl
 KAT            3

[ atoms ]
   1   ca    1   KAT    C    1    -0.005220    12.01000 ; qtot 0.000
   2   ca    1   KAT   C1    2    -0.097410    12.01000 ; qtot 0.000
   3   ca    1   KAT   C2    3     0.012648    12.01000 ; qtot 0.000
   4   ca    1   KAT   C3    4    -0.095690    12.01000 ; qtot 0.000
   5   ca    1   KAT   C4    5    -0.006692    12.01000 ; qtot 0.000
   6   nb    1   KAT    N    6     0.173897    14.01000 ; qtot 0.000
   7   h4    1   KAT    H    7     0.224185     1.00800 ; qtot 0.000
   8   ha    1   KAT   H1    8     0.197455     1.00800 ; qtot 0.000
   9   ha    1   KAT   H2    9     0.175383     1.00800 ; qtot 0.000
  10   ha    1   KAT   H3   10     0.196707     1.00800 ; qtot 0.000
  11   h4    1   KAT   H4   11     0.224737     1.00800 ; qtot 0.000


[ bonds ]
;  ai    aj funct   r             k
   1     2   1    1.3984e-01    3.8585e+05 ;     C - C1
   1     6   1    1.3390e-01    4.0836e+05 ;     C - N
   1     7   1    1.0890e-01    2.8577e+05 ;     C - H
   2     3   1    1.3984e-01    3.8585e+05 ;    C1 - C2
   2     8   1    1.0860e-01    2.8937e+05 ;    C1 - H1
   3     4   1    1.3984e-01    3.8585e+05 ;    C2 - C3
   3     9   1    1.0860e-01    2.8937e+05 ;    C2 - H2
   4     5   1    1.3984e-01    3.8585e+05 ;    C3 - C4
   4    10   1    1.0860e-01    2.8937e+05 ;    C3 - H3
   5     6   1    1.3390e-01    4.0836e+05 ;    C4 - N
   5    11   1    1.0890e-01    2.8577e+05 ;    C4 - H4

[ pairs ]
;  ai    aj    funct
   1     4     1 ;     C - C3
   1     9     1 ;     C - H2
   1    11     1 ;     C - H4
   2     5     1 ;    C1 - C4
   2    10     1 ;    C1 - H3
   3     6     1 ;    C2 - N
   3    11     1 ;    C2 - H4
   4     8     1 ;    C3 - H1
   5     9     1 ;    C4 - H2
   6     8     1 ;     N - H1
   6    10     1 ;     N - H3
   7     3     1 ;     H - C2
   7     5     1 ;     H - C4
   7     8     1 ;     H - H1
   8     9     1 ;    H1 - H2
   9    10     1 ;    H2 - H3
  10    11     1 ;    H3 - H4
```

```
[ angles ]
;  ai    aj    ak    funct   theta       cth
    1     2     3     1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;     C - C1    - C2
    1     2     8     1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;     C - C1    - H1
    1     6     5     1   1.1722e+02   5.7153e+02 ;     C - N     - C4
    2     1     6     1   1.2294e+02   5.7572e+02 ;    C1 - C     - N
    2     1     7     1   1.2034e+02   4.0250e+02 ;    C1 - C     - H
    2     3     4     1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;    C1 - C2    - C3
    2     3     9     1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C1 - C2    - H2
    3     2     8     1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C2 - C1    - H1
    3     4     5     1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;    C2 - C3    - C4
    3     4    10     1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C2 - C3    - H3
    4     3     9     1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C3 - C2    - H2
    4     5     6     1   1.2294e+02   5.7572e+02 ;    C3 - C4    - N
    4     5    11     1   1.2034e+02   4.0250e+02 ;    C3 - C4    - H4
    5     4    10     1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C4 - C3    - H3
    6     1     7     1   1.1603e+02   4.3430e+02 ;     N - C     - H
    6     5    11     1   1.1603e+02   4.3430e+02 ;     N - C4    - H4

[ dihedrals ] ; propers
; treated as RBs in GROMACS to use combine multiple AMBER torsions per quartet
;  i     j     k     l  func    C0         C1         C2         C3         C4         C5
    1     2     3     4     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C-    C1-
C2-   C3
    1     2     3     9     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C-    C1-
C2-   H2
    1     6     5     4     3   40.16640    0.00000  -40.16640    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C-    N-
C4-   C3
    1     6     5    11     3   40.16640    0.00000  -40.16640    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C-    N-
C4-   H4
    2     1     6     5     3   40.16640    0.00000  -40.16640    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C1-    C-
N-    C4
    2     3     4     5     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C1-    C2-
C3-   C4
    2     3     4    10     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C1-    C2-
C3-   H3
    3     4     5     6     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C2-    C3-
C4-    N
    3     4     5    11     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C2-    C3-
C4-   H4
    4     3     2     8     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C3-    C2-
C1-   H1
    5     4     3     9     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C4-    C3-
C2-   H2
    6     1     2     3     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     N-    C-
C1-   C2
    6     1     2     8     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     N-    C-
C1-   H1
    6     5     4    10     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     N-    C4-
C3-   H3
    7     1     2     3     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     H-    C-
C1-   C2
```

```
   7     1     2     8     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    H-   C-
C1-   H1
   7     1     6     5     3   40.16640    0.00000  -40.16640    0.00000    0.00000    0.00000 ;    H-   C-   N-
C4
   8     2     3     9     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    H1-   C1-
C2-   H2
   9     3     4    10     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    H2-   C2-
C3-   H3
  10     4     5    11     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    H3-   C3-
C4-   H4

[ dihedrals ] ; impropers
; treated as propers in GROMACS to use correct AMBER analytical function
;   i     j     k     l  func   phase     kd      pn
   1     3     2     8     1   180.00   4.60240   2 ;    C-   C2-   C1-   H1
   2     4     3     9     1   180.00   4.60240   2 ;    C1-   C3-   C2-   H2
   3     5     4    10     1   180.00   4.60240   2 ;    C2-   C4-   C3-   H3
   4    11     5     6     1   180.00   4.60240   2 ;    C3-   H4-   C4-    N
   6     1     7     2     1   180.00   4.60240   2 ;    N-   C-   H-   C1
```

PYH.itp

```
[ moleculetype ]
;name          nrexcl
 KIH           3

[ atoms ]
   1   ca    1   KIH    C    1    0.025607    12.01000 ; qtot 0.000
   2   ca    1   KIH    C1   2    -0.108771    12.01000 ; qtot 0.000
   3   ca    1   KIH    C2   3    0.052674    12.01000 ; qtot 0.000
   4   ca    1   KIH    C3   4    -0.105709    12.01000 ; qtot 0.000
   5   ca    1   KIH    C4   5    0.021791    12.01000 ; qtot 0.000
   6   na    1   KIH    N    6    -0.080585    14.01000 ; qtot 0.000
   7   h4    1   KIH    H    7    0.178498    1.00800 ; qtot 0.000
   8   ha    1   KIH    H1   8    0.178860    1.00800 ; qtot 0.000
   9   ha    1   KIH    H2   9    0.156149    1.00800 ; qtot 0.000
  10   ha    1   KIH    H3   10    0.177700    1.00800 ; qtot 0.000
  11   h4    1   KIH    H4   11    0.180099    1.00800 ; qtot 0.000
  12   hn    1   KIH    H5   12    0.323687    1.00800 ; qtot 0.000
[ bonds ]
;  ai    aj funct   r           k
   1     2   1    1.3984e-01    3.8585e+05 ;     C - C1
   1     6   1    1.3840e-01    3.5187e+05 ;     C - N
   1     7   1    1.0890e-01    2.8577e+05 ;     C - H
   2     3   1    1.3984e-01    3.8585e+05 ;    C1 - C2
   2     8   1    1.0860e-01    2.8937e+05 ;    C1 - H1
   3     4   1    1.3984e-01    3.8585e+05 ;    C2 - C3
   3     9   1    1.0860e-01    2.8937e+05 ;    C2 - H2
   4     5   1    1.3984e-01    3.8585e+05 ;    C3 - C4
   4    10   1    1.0860e-01    2.8937e+05 ;    C3 - H3
   5     6   1    1.3840e-01    3.5187e+05 ;    C4 - N
   5    11   1    1.0890e-01    2.8577e+05 ;    C4 - H4
   6    12   1    1.0100e-01    3.4175e+05 ;     N - H5

[ pairs ]
;  ai    aj    funct
   1     4     1 ;     C - C3
   1     9     1 ;     C - H2
   1    11     1 ;     C - H4
   2     5     1 ;    C1 - C4
   2    10     1 ;    C1 - H3
   2    12     1 ;    C1 - H5
   3     6     1 ;    C2 - N
   3    11     1 ;    C2 - H4
   4     8     1 ;    C3 - H1
   4    12     1 ;    C3 - H5
   5     9     1 ;    C4 - H2
   6     8     1 ;     N - H1
   6    10     1 ;     N - H3
   7     3     1 ;     H - C2
   7     5     1 ;     H - C4
   7     8     1 ;     H - H1
   7    12     1 ;     H - H5
```

```
   8     9     1 ;    H1 - H2
   9    10     1 ;    H2 - H3
  10    11     1 ;    H3 - H4
  11    12     1 ;    H4 - H5

[ angles ]
;  ai    aj    ak    funct   theta       cth
   1     2     3     1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;     C - C1    - C2
   1     2     8     1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;     C - C1    - H1
   1     6     5     1   1.2005e+02   5.4643e+02 ;     C - N     - C4
   1     6    12     1    1.2554e+02   3.8995e+02 ;     C - N     - H5
   2     1     6     1   1.1834e+02   5.7823e+02 ;    C1 - C     - N
   2     1     7     1   1.2034e+02   4.0250e+02 ;    C1 - C     - H
   2     3     4     1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;    C1 - C2    - C3
   2     3     9     1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C1 - C2    - H2
   3     2     8     1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C2 - C1    - H1
   3     4     5     1   1.2002e+02   5.5731e+02 ;    C2 - C3    - C4
   3     4    10     1    1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C2 - C3    - H3
   4     3     9     1   1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C3 - C2    - H2
   4     5     6     1   1.1834e+02   5.7823e+02 ;    C3 - C4    - N
   4     5    11     1    1.2034e+02   4.0250e+02 ;    C3 - C4    - H4
   5     4    10     1    1.1988e+02   4.0334e+02 ;    C4 - C3    - H3
   5     6    12     1    1.2554e+02   3.8995e+02 ;    C4 - N     - H5
   6     1     7     1   1.1632e+02   4.2258e+02 ;     N - C     - H
   6     5    11     1    1.1632e+02   4.2258e+02 ;     N - C4    - H4

[ dihedrals ] ; propers
; treated as RBs in GROMACS to use combine multiple AMBER torsions per quartet
;  i     j     k     l  func    C0        C1        C2        C3        C4        C5
   1     2     3     4     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C-    C1-
C2-   C3
   1     2     3     9     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C-    C1-
C2-   H2
   1     6     5     4     3    2.51040    0.00000   -2.51040    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C-    N-    C4-
C3
   1     6     5    11     3    2.51040    0.00000   -2.51040    0.00000    0.00000    0.00000 ;     C-    N-    C4-
H4
   2     1     6     5     3    2.51040    0.00000   -2.51040    0.00000    0.00000    0.00000 ;    C1-    C-    N-
C4
   2     1     6    12     3    2.51040    0.00000   -2.51040    0.00000    0.00000    0.00000 ;    C1-    C-    N-
H5
   2     3     4     5     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    C1-    C2-
C3-   C4
   2     3     4    10     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    C1-    C2-
C3-   H3
   3     4     5     6     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    C2-    C3-
C4-    N
   3     4     5    11     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    C2-    C3-
C4-   H4
   4     3     2     8     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    C3-    C2-
C1-   H1
   4     5     6    12     3    2.51040    0.00000   -2.51040    0.00000    0.00000    0.00000 ;    C3-    C4-
N-   H5
```

```
   5     4     3     9     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    C4-   C3-
C2-   H2
   6     1     2     3     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    N-    C-
C1-   C2
   6     1     2     8     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    N-    C-
C1-   H1
   6     5     4    10     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    N-   C4-
C3-   H3
   7     1     2     3     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    H-    C-
C1-   C2
   7     1     2     8     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;    H-    C-
C1-   H1
   7     1     6     5     3    2.51040    0.00000   -2.51040    0.00000    0.00000    0.00000 ;    H-    C-    N-
C4
   7     1     6    12     3    2.51040    0.00000   -2.51040    0.00000    0.00000    0.00000 ;    H-    C-    N-
H5
   8     2     3     9     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;   H1-   C1-
C2-   H2
   9     3     4    10     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;   H2-   C2-
C3-   H3
  10     4     5    11     3   30.33400    0.00000  -30.33400    0.00000    0.00000    0.00000 ;   H3-   C3-
C4-   H4
  11     5     6    12     3    2.51040    0.00000   -2.51040    0.00000    0.00000    0.00000 ;   H4-   C4-
N-    H5

[ dihedrals ] ; impropers
; treated as propers in GROMACS to use correct AMBER analytical function
;   i     j     k     l  func   phase     kd      pn
   1     3     2     8     1   180.00   4.60240   2 ;     C-    C2-    C1-    H1
   1     5     6    12     1   180.00   4.60240   2 ;     C-    C4-     N-    H5
   2     4     3     9     1   180.00   4.60240   2 ;    C1-    C3-    C2-    H2
   3     5     4    10     1   180.00   4.60240   2 ;    C2-    C4-    C3-    H3
   4    11     5     6     1   180.00   4.60240   2 ;    C3-    H4-    C4-     N
   6     1     7     2     1   180.00   4.60240   2 ;     N-     C-     H-    C1
```