SUPPORTING INFORMATION

Characterization of Biaryl Torsional Energetics and its Treatment in the OPLS/CM1A Force Field

Markus K. Dahlgren, Patric Schyman, Julian Tirado-Rives, and William L. Jorgensen*

Department of Chemistry, Yale University, New Haven, Connecticut 06520-8107, United States

Table S1. OPLS Bond Stretching Parameters

bond	r_0 (Å)	k_b (kcal mol^{-1} Å^{-2})	bond	r_0 (Å)	k_b (kcal mol^{-1} Å^{-2})
S -CP	1.710	250	OS-CW	1.360	340
NS-CT	1.475	337	NX-NB	1.350	400
C!-C!	1.460	385	NA-CR	1.343	477
C!-CS	1.460	385	CM-C=	1.340	549
C!-CP	1.460	385	NC-C!	1.339	483
C!-CR	1.460	385	NC-CA	1.339	483
C=-C=	1.460	385	NB-CR	1.335	488
C!-CW	1.460	385	NC-CQ	1.324	502
C -CM	1.444	410	NC-NC	1.320	500
NX-C!	1.440	385	NB-CU	1.320	410
CS-CS	1.424	469	NB-NB	1.280	400
CU-CS	1.424	469	O -C	1.229	570
CA-C!	1.400	469	CT-HC	1.090	340
CA-CA	1.400	469	CP-HA	1.080	367
NB-CV	1.394	410	CV-HA	1.080	367
NA-C	1.388	418	CA-HA	1.080	367
NA-C!	1.381	427	CW-HA	1.080	367
NA-CW	1.381	427	CS-HA	1.080	367
NS-CW	1.381	427	CU-HA	1.080	367
C!-C=	1.380	385	CM-HC	1.080	340
CP-CS	1.380	546	C=-HC	1.080	340
NX-CW	1.380	427	CQ-HA	1.080	367
CV-CW	1.370	520	NA-H	1.010	434
CS-CW	1.367	546			

Table S2. OPLS Angle Bending Parameters

angle	θ_0 (deg)	k_υ (kcal mol^{-1} rad^{-2})	angle	θ_0 (deg)	k_υ (kcal mol^{-1} rad^{-2})
CS-CW-HA	132.1	35	NB-NX-C!	119.9	63
C!-CW-CS	132.1	70	C!-C=-HC	119.9	35
CV-CW-HA	130.7	35	NX-C!-CA	119.8	63
CS-CU-HA	129.2	35	C –CM-HC	119.7	35
NC-CQ-NC	129.1	70	NA-C!-C=	119.6	70
CU-CS-HA	128.5	35	NB-CU-HA	118.9	35
CS-CP-HA	128.2	35	CQ-NC-CA	118.6	70
CW-CV-HA	128.2	35	NC-NC-CQ	118.2	70
C!-CP-CS	127.7	63	C!-C=-C=	118.1	70
CS-CS-C!	127.5	70	C!-NA-H	118.0	35
CS-CS-HA	127.5	35	OS-CW-C!	117.3	70
C –NA-C!	126.6	70	NA-C!-CP	117.2	63
NC-C!-NC	126.3	70	NC-C!-CW	117.1	70
C=-C!-CR	126.0	63	NC-NC-C!	117.0	70
C!-CS-CW	125.7	70	C!-NC-CA	117.0	70
CW-CS-HA	125.7	35	NC-C!-CS	117.0	63
O –C -CM	125.3	80	NC-C!-CP	116.8	63
NB-CR-C!	125.2	70	NC-C!-C!	116.8	70
C!-NA-CW	125.2	63	C -NA-H	116.8	35
C!-NX-CW	125.2	63	NA-C!-CS	116.8	63
C=-C!-CW	124.7	63	NC-C!-CR	116.6	70
C=-C!-CS	124.2	63	NA-C!-C!	116.6	63
CT-NS-CW	124.0	70	NA-C!-CW	116.4	70
NC-CA-CA	124.0	70	NC-C!-NX	116.2	63
CM-C=-C=	124.0	70	NC-CA-HA	116.0	35
CW-NA-H	124.0	35	NA-C!-NX	115.7	63
CW-NS-CT	124.0	70	NC-CQ-HA	115.45	35
CR-NA-H	124.0	35	NA-C!-CR	114.3	63
C=-C!-C!	123.9	63	NA-C -CM	114.1	70
CP-C!-C=	123.8	63	OS-CW-HA	113.4	35
NX-C!-C=	123.8	63	NB-NX-CW	113.1	56
CP-CS-C!	123.6	63	CS-CS-CP	112.3	70
CP-CS-HA	123.1	35	NB-CR-NB	112.2	70
NA-CR-C!	123.1	70	NB-CU-CS	111.9	70
S -CP-C!	121.7	63	S -CP-CS	111.0	70
C=-CM-C	121.7	85	NB-CV-CW	111.0	70
NA-CW-C!	121.6	70	OS-CW-CS	110.6	70
NA-CW-HA	121.6	35	NA-CR-NB	110.5	70
NS-CW-HA	121.6	35	CV-NB-CR	110.0	70
NS-CW-C!	121.6	70	CW-NA-CW	109.8	70
NX-CW-HA	121.6	35	CW-NS-CW	109.8	70
O -C -NA	120.6	80	CR-NA-CW	109.8	70
CP-C!-CA	120.5	63	CW-NX-CW	109.8	70

S -CP-HA	120.0	35	NS-CT-HC	109.5	35
C!-C!-CA	120.0	63	NB-NB-NB	109.4	70
C!-CA-CA	120.0	63	NB-NB-CR	109.0	70
CA-CA-CA	120.0	63	HC-CT-HC	107.8	33
C!-CA-HA	120.0	35	NA-CW-CS	107.7	70
CA-CA-HA	120.0	35	NS-CW-CS	107.7	70
CA-C!-CA	120.0	63	NX-CW-CS	107.7	70
CS-C!-CA	120.0	63	CS-CS-CW	107.3	70
CW-C!-CA	120.0	63	CW-OS-CW	106.5	70
CM-C=-HC	120.0	35	NA-CW-CV	106.3	70
C=-CM-HC	120.0	35	NX-NB-CU	104.1	70
CR-C!-CA	120.0	63	CW-CS-CU	103.8	70
NB-CV-HA	120.0	35	CP-S –CP	92.2	70
C=-C=-HC	120.0	35			

Table S3. **New OPLS/CM1A Dihedral Parameters (kcal/mol)**

Dihedral Atom Types	Used in Biaryl #	V_1	V_2	V_3	V_4
CA-C!-C!-CA	**1**	0.00	1.97	0.00	0.00
CA-C!-C!-NC	**2**	0.00	2.01	0.00	0.00
CA-C!-CS-CW	**3**	0.00	1.49	0.00	0.00
CA-C!-CS-CS	**3, 4**	0.00	1.49	0.00	0.00
CA-C!-CS-CP	**4**	0.00	1.49	0.00	0.00
CA-C!-CW-CS	**5, 7, 8**	0.00	1.49	0.00	0.00
CA-C!-CW-OS	**5**	0.00	1.73	0.00	0.00
CA-C!-CP-CS	**6**	0.00	1.49	0.00	0.00
CA-C!-CP-S	**6**	0.00	1.33	0.00	0.00
CA-C!-CW-NA	**7**	0.00	2.00	0.00	0.00
CA-C!-CW-NS	**8**	0.00	3.01	0.00	0.22
CA-C!-CR-NB	**9**	0.00	1.59	0.00	0.00
CA-C!-CR-NA	**9**	0.00	2.00	0.00	0.00
CA-C!-NX-CW	**10, 11**	0.00	1.47	0.00	-0.07
CA-C!-NX-NB	**11**	0.00	1.76	0.00	0.00
NC-C!-C!-NC	**12**	0.00	1.11	0.00	-0.13
NC-C!-CS-CS	**13, 14**	0.00	1.95	0.00	0.00
NC-C!-CS-CW	**13**	0.00	1.95	0.00	0.00
NC-C!-CW-CS	**15, 17, 18**	0.00	1.95	0.00	0.00
NC-C!-CS-CP	**14**	0.00	1.95	0.00	0.00
NC-C!-CP-CS	**16**	0.00	1.95	0.00	0.00
NC-C!-CW-OS	**15**	0.00	2.29	0.00	0.00
NC-C!-CP-S	**16**	0.00	2.65	0.00	0.00
NC-C!-CW-NA	**17**	0.00	3.33	0.00	0.00
NC-C!-CW-NS	**18**	0.00	3.70	0.00	0.00
NC-C!-CR-NB	**19**	0.00	1.03	0.00	0.00

NC-C!-CR-NA	**19**	0.00	3.33	0.00	0.00
NC-C!-NX-CW	**20**	0.00	2.49	0.00	0.00
NA-C!-C!-CA	**21**	0.00	1.60	0.00	-0.18
C=-C!-C!-CA	**21**	0.00	1.97	0.00	0.00
NA-C!-C!-NC	**22**	0.00	2.84	0.00	0.00
C=-C!-C!-NC	**22**	0.00	2.01	0.00	0.00
NA-C!-CS-CS	**23, 24**	2.75	1.21	1.09	0.00
C=-C!-CS-CS	**23, 24**	0.00	1.49	0.00	0.00
NA-C!-CS-CW	**23**	1.50	1.50	0.87	0.00
C=-C!-CS-CW	**23**	0.00	1.49	0.00	0.00
NA-C!-CW-CS	**25, 27, 28**	2.75	1.21	1.09	0.00
C=-C!-CW-CS	**25, 27, 28**	0.00	1.49	0.00	0.00
NA-C!-CS-CP	**24**	2.91	1.83	1.21	0.00
C=-C!-CS-CP	**24**	0.00	1.49	0.00	0.00
NA-C!-CP-CS	**26**	2.91	1.83	1.21	0.00
C=-C!-CP-CS	**26**	0.00	1.49	0.00	0.00
NA-C!-CW-OS	**25**	2.80	2.10	1.30	0.00
C=-C!-CW-OS	**25**	0.00	1.73	0.00	0.00
NA-C!-CP-S	**26**	0.63	0.80	1.54	-0.74
C=-C!-CP-S	**26**	0.00	1.33	0.00	0.00
NA-C!-CW-NA	**27**	7.33	2.18	0.51	0.00
C=-C!-CW-NA	**27**	0.00	2.00	0.00	0.00
NA-C!-CW-NS	**28**	6.25	1.78	1.43	0.00
C=-C!-CW-NS	**28**	0.00	3.01	0.00	0.22
NA-C!-CR-NB	**29**	4.00	2.13	1.60	0.00
C=-C!-CR-NB	**29**	0.00	1.59	0.00	0.00
C=-C!-CR-NA	**29**	0.00	2.00	0.00	0.00
NA-C!-CR-NA	**29**	7.33	2.18	0.51	0.00
NA-C!-NX-CW	**30**	0.00	1.28	0.65	-0.23
C=-C!-NX-CW	**30**	0.00	1.47	0.00	-0.07

Table S4. **Other OPLS Dihedral Parameters (kcal/mol)**[a]

Dihedral Atom Types	V_1	V_2	V_3	V_4
S –CP-CS-HA	0.00	10.75	0.00	0.00
H –NA-CW-C!	0.00	5.00	0.00	0.00
CW-NA-CW-CS	0.00	5.00	0.00	0.00
H –NA-CW-CS	0.00	5.00	0.00	0.00
CW-NA-CW-C!	0.00	5.00	0.00	0.00
HA-CW-NA-CW	0.00	5.00	0.00	0.00
H –NA-CW-HA	0.00	5.00	0.00	0.00
CT-NS-CW-C!	0.00	5.00	0.00	0.00
CS-CW-NS-CW	0.00	5.00	0.00	0.00
CW-NS-CW-C!	0.00	5.00	0.00	0.00

CT-NS-CW-CS	0.00	5.00	0.00	0.00
HA-CW-NS-CW	0.00	5.00	0.00	0.00
HA-CW-NS-CT	0.00	5.00	0.00	0.00
HC-CT-NS-CW	0.00	0.00	0.00	0.00

[a]All aryl atom type strings that are not in table S3 or table S4 have a single component with V_2=7.25 to enforce planarity.