The free energy change breakdown 0.040 0.035 -0.030 VG (kcal/mol) 0.015 0.010 -0.005 -TI-CUBIC 0.000

7--8

8--9

States

10--11

11--12

12--13

9--10

14--15

15--16

13--14

4--5

0--1

1--2

2--3

3--4

5--6

6--7