1) 2)

Taken from our previous work (ref 17 from the SI pdf)

3) $140_3 - 135 + (136 + 157) - 154 - 155$

4) $140_3 - 135 + (136 + 157) - 154 - 155$

5) $140_3 - 135 - 136 - 137 - 157 - 154 - 155$

6) $164 - 161 - 160 - 160 - 163$

7) $140_3 - 135 + (136 + 158) - 136 - 136 - 135 - 140$

8) $140_3 - 135 + (136 + 137) - 157 - 154 - 155$

9) $965_3 - 961 + (962 + 961) - 965_3$

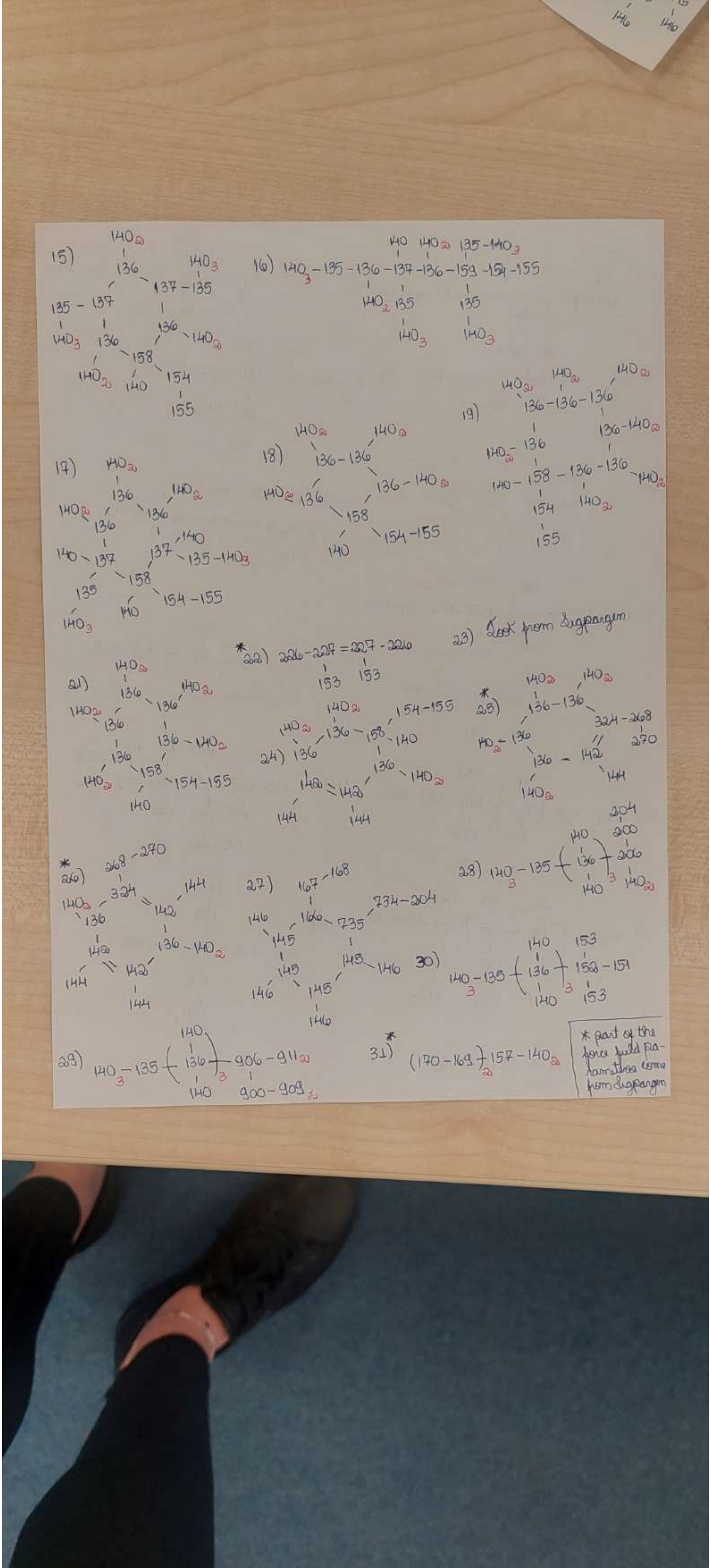
10) $140_3 - 135 + (136 + 158) - 135 - 140_3$

11) $140_3 - 135 - 137 - 137 - 137 - 157 - 154$

12) $140_3 - 135 - 136 + (137 + 158) - 154 - 155$

13) $140_3 - 135 - 159 - 154 - 155$

14) $(135 - 136) + 159 - 154 - 155$



23) Look from Sugpangen.
* part of the force field parameters come from Sugpangen

32) 170 - 169 - 157 (136 (140, 140))$_3$ 157 - 169 - 170 ; 140$_2$; 140$_2$

35) 140$_3$ - 135 (136 (140, 140))$_3$ 957 - 956 ; 958$_2$

34) 140$_3$ - 135 - 136 - 182 - 180 - 182 - 135 - 140$_3$; 140$_2$; 185$_2$; 185$_2$

36) 140$_3$ - 135 (136 (140, 140))$_3$ 957 - 722 ; 958$_2$

*37) 140 - 135 (136 (140, 140)) 957 ; 958
atom types taken from Sugpargen (which therefore means non bonded potential parameters)

38) 140$_3$ - 135 (136 (140, 140))$_2$ 136 - 277 = 278 ; 282$_2$; 279

40) 140$_3$ - 135 - 136 - 465 = 466 ; 140$_2$; 465 - 467 - 490 - 469$_2$; 490 - 135 - 140$_3$

39) 140$_3$ - 135 - 136 (282, 282) - 280 (= 281) - 136 (282, 282) - 135 - 140$_3$

* part of the force field parameters come from Sugpargen

41) 269 = 267 (136 (140, 140))$_3$ 135 - 140$_3$; 267 - 268 - 270

43)* 140$_3$ - 135 (136 (140, 140))$_2$ 756 - 754 - 753 ; 759$_2$

*45) 202 = 212 = 202

48) Took from Sugpargen

*46) 494 = 493 - 499 ; 494 = 493 ; 140$_2$ - 499 ; 499 - 140$_2$; 136 - 136 ; 140$_2$; 140$_2$

47) 721 - 720 ; 721 - 720 ; 720 - 721 ; 720 O ; 720 - 721 ; 721 - 720 ; 720 - 721

49) 172 - 171 - 173 - 174 - 173 ; 176$_2$; 176 ; 171 ; 172 ; 171 ; 172 ; 176$_2$

51) 140$_3$ - 135 - 136 - 152 - 151 ; 140$_2$; 153 ; 153

50) 140$_3$ - 135 - 206 - 200 - 204 ; 140$_2$

52) $140_3 - 135 - 136 - 906 - 900 - 909_2$
140_2 911_2

53) $140_3 - 135 - 182 - 180 - 186 - 135 - 140_3$
185_2 185_2

54) $140_3 - 135 - 136 - 136 - 957 - 956$
140_2 140_2 958_2

55) $140_3 - 135 - 136 - 136 - 136 - 135 - 140$
140_2 140_2 140_2

54) $140_3 - 135 - 136 - 277 = 278$
282_2 279

58) $140_3 - 135 - 267 = 269$
$268 - 270$

59) $279 - 267 = 269$
268
270

(60) $282_3 - 135 - 280 - 135 - 280_3$
281

61) $279 - 465 = 466$
$467 - 468 - 469_3$

62) $279 - 235 = 236$
237
240_2

*63) $759_3 - 755 - 754 \equiv 753$

*64) $144_2 - 143 = 517 - 154 - 155$
185

*65)
958
$958 - 957 - 956$
$154 - 155$

*66) $155 - 154 - 754 \equiv 753$

*67) $911_2 - 906 - 154 - 155$
$900 - 909_2$

*69) $140_2 - 206 - 200 - 204$
$154 - 155$

70)
140
$140_3 - 135 - 137 - 135 - 140_3$
$140_2 - 136$
$135 - 140_3$

71)
146
145
$146 \quad 145 \quad 145 \quad 146$
$145 \quad 145 \quad 145 \quad 146$
$146 \quad 145$
146

72)
281
$282_3 - 135 - 280 - 136 - 135 - 140_3$
280_2

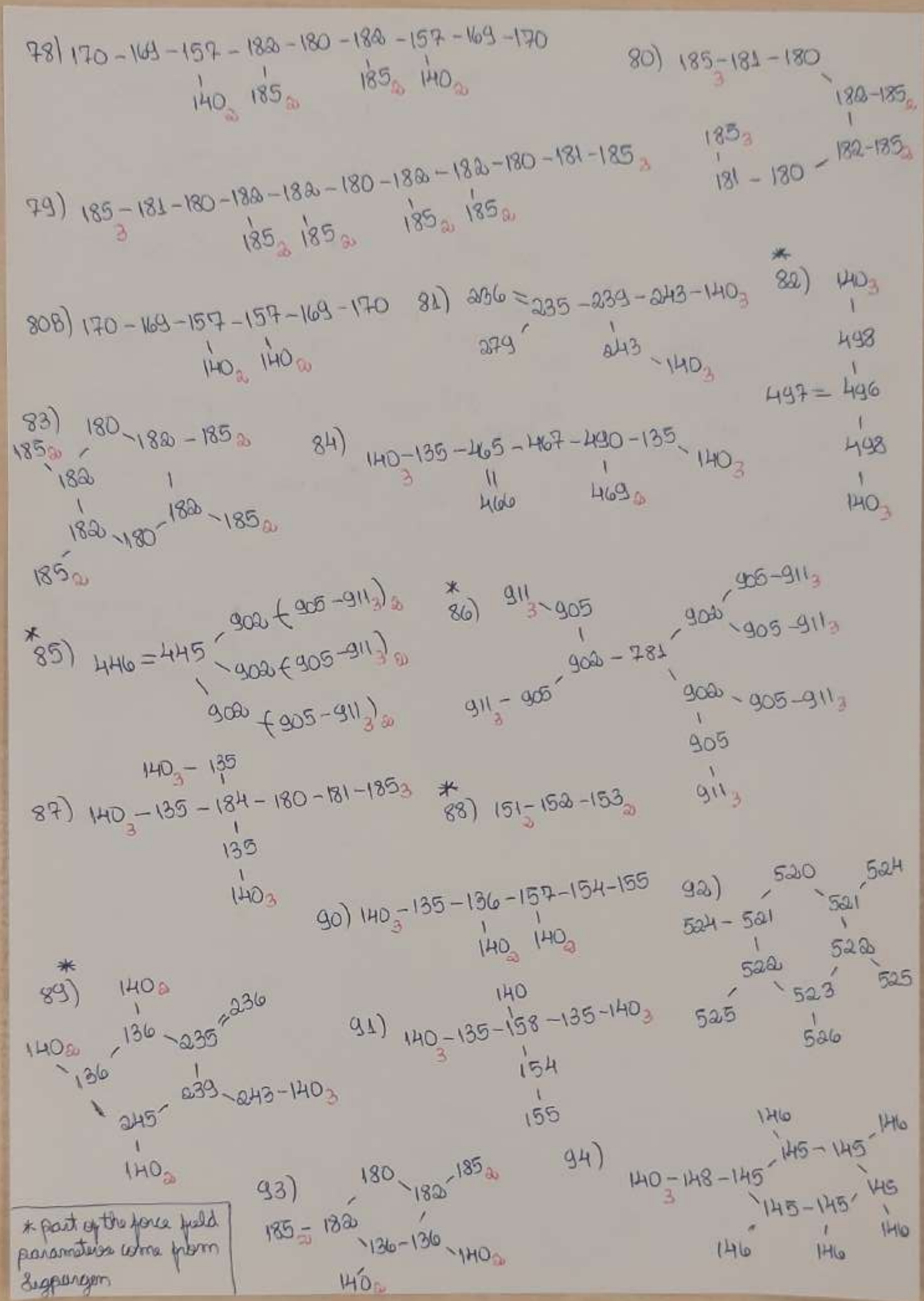
73)
123
$123 - 122 - 123$
123

74)
146
$264 - 263 \quad 145 - 145 \quad 146$
$145 - 145 \quad 145 - 146$
$146 \quad 146$

* part of the force field parameters come from Lagrangian

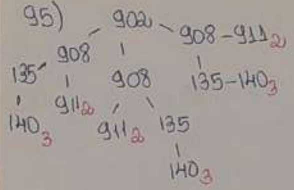
76)
140_2
$140_2 - 136 \quad 136 - 136 \quad 136 - 140_2$
$136 - 136$
$140_2 \quad 140_2$

77) $151 - 152 - 152 - 151$
$153_2 \quad 153_2$

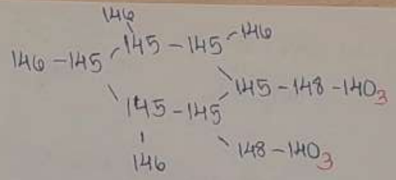


78) 170 - 169 - 157 - 182 - 180 - 182 - 157 - 169 - 170
80) 185 - 181 - 180
79) 185 - 181 - 180 - 182 - 182 - 180 - 182 - 182 - 180 - 181 - 185
80B) 170 - 169 - 157 - 157 - 169 - 170
81) 236 = 235 - 239 - 243 - 140
82) 140
83) 180 - 182 - 185
84) 140 - 135 - 465 - 467 - 490 - 135 - 140
85) 446 = 445
86) 911 - 905
87) 140 - 135 - 184 - 180 - 181 - 185
88) 151 - 152 - 153
89) 140
90) 140 - 135 - 136 - 157 - 154 - 155
91) 140 - 135 - 158 - 135 - 140
92) 520
93) 180 - 182 - 185
94) 140 - 148 - 145
* part of the force field parameters come from Sugarogen

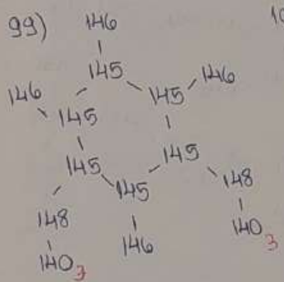
95)



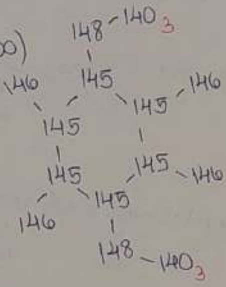
98)



99)



100)



*101) $140_3-209-202-209-140_3$

102) Taken from Ligpargen

103) Taken from Ligpargen

*105) $144_2-143=207-200-204$
140

* part of the force field parameters come from Ligpargen.