

## **Chapter 1**

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat voluptatem. Ut enim aeque doleamus animo, cum corpore dolemus, fieri tamen permagna accessio potest, si aliquod aeternum et infinitum impendere malum nobis opinemur. Quod idem licet transferre in voluptatem, ut postea variari voluptas distinguique possit, augeri amplificarique non possit. At etiam Athenis, ut e patre audiebam facete et urbane Stoicos irridente, statua est in quo a nobis philosophia defensa et collaudata est, cum id, quod maxime placeat, facere possimus, omnis voluptas assumenda est, omnis dolor repellendus. Temporibus autem quibusdam et aut officiis debitis aut rerum necessitatibus saepe eveniet, ut et voluptates repudiandae sint et molestiae non recusandae. Itaque earum rerum defuturum, quas natura non depravata desiderat. Et quem ad me accedis, saluto: 'chaere,' inquam, 'Tite!' lictores, turma omnis chorusque: 'chaere, Tite!' hinc hostis mi Albucius, hinc inimicus. Sed iure Mucius.

### Introduction

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat voluptatem. Ut enim aeque doleamus animo, cum corpore dolemus, fieri tamen permagna accessio potest, si aliquod aeternum et infinitum impendere malum nobis opinemur. Quod idem licet transferre in voluptatem, ut. We follow the nomenclature of IUPAC [1].

### **Methods**

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat voluptatem. Ut enim aeque doleamus animo, cum corpore dolemus, fieri tamen permagna accessio potest, si aliquod aeternum et infinitum impendere malum nobis opinemur. Quod idem licet transferre in voluptatem, ut. This software package is the absolute best [2]!

### **Results**

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat voluptatem. Ut enim aeque doleamus animo, cum corpore dolemus, fieri tamen permagna accessio potest, si aliquod aeternum et infinitum impendere malum nobis opinemur. Quod idem licet transferre in voluptatem, ut.

In terms of formalisms, the Cremer-Pople formalism is top notch [3].

## Conclusion

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat.

# **Bibliography**

- [1] I.-I. J. C. on Biochemical Nomenclature (JCBN), "Abbreviations and Symbols for the Description of Conformations of Polynucleotide Chains", *European Journal of Biochemistry*, vol. 131, pp. 9–15, 1983.
- [2] F. Neese, F. Wennmohs, U. Becker, and C. Riplinger, "The ORCA quantum chemistry program package", *The Journal of Chemical Physics*, vol. 152, no. 22, p. 224108, 2020.
- [3] D. Cremer and J. Pople, "General definition of ring puckering coordinates", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 97, no. 6, pp. 1354–1358, 1975.
- [4] C. Haasnoot, "The conformation of six-membered rings described by puckering coordinates derived from endocyclic torsion angles", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 114, no. 3, pp. 882–887, 1992.
- [5] S.-M. Rings, "Conformational nomenclature for five and six-membered ring forms of monosaccharides and their derivatives", *Eur J Biochem*, vol. 100, pp. 295–298, 1980.

[6] M. Sega, E. Autieri, and F. Pederiva, "Pickett angles and Cremer–Pople coordinates as collective variables for the enhanced sampling of six-membered ring conformations", *Molecular Physics*, vol. 109, no. 1, pp. 141–148, Jan. 2011, doi: 10.1080/00268976.2010.522208.

## **Chapter 2**

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat voluptatem. Ut enim aeque doleamus animo, cum corpore dolemus, fieri tamen permagna accessio potest, si aliquod aeternum et infinitum impendere malum nobis opinemur. Quod idem licet transferre in voluptatem, ut postea variari voluptas distinguique possit, augeri amplificarique non possit. At etiam Athenis, ut e patre audiebam facete et urbane Stoicos irridente, statua est in quo a nobis philosophia defensa et collaudata est, cum id, quod maxime placeat, facere possimus, omnis voluptas assumenda est, omnis dolor repellendus. Temporibus autem quibusdam et aut officiis debitis aut rerum necessitatibus saepe eveniet, ut et voluptates repudiandae sint et molestiae non recusandae. Itaque earum rerum defuturum, quas natura non depravata desiderat. Et quem ad me accedis, saluto: 'chaere,' inquam, 'Tite!' lictores, turma omnis chorusque: 'chaere, Tite!' hinc hostis mi Albucius, hinc inimicus. Sed iure Mucius.

### Introduction

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat voluptatem. Ut enim aeque doleamus animo, cum corpore dolemus, fieri tamen permagna accessio potest, si aliquod aeternum et infinitum impendere malum nobis opinemur. Quod idem licet transferre in voluptatem, ut.. Afterwards the thing [4] did cool thing, together with stuff [5].

### **Methods**

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat voluptatem. Ut enim aeque doleamus animo, cum corpore dolemus, fieri tamen permagna accessio potest, si aliquod aeternum et infinitum impendere malum nobis opinemur. Quod idem licet transferre in voluptatem, ut. We did the method of Sega *et al.* [6]

### Results

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat voluptatem. Ut enim aeque doleamus animo, cum corpore dolemus, fieri tamen permagna accessio potest, si aliquod aeternum et infinitum impendere malum nobis opinemur. Quod idem licet transferre in voluptatem, ut.

### Conclusion

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat.