Thermodynamic variables BOND ANGLE DIHED **IMPRP** ELECT 46500 -900 -69000 **-**12700 -800 -46000 --1180000 **-**68000 -12500 **-**700 -12300 45500 **-**67000 --1190000 **-**12100 **-**600 -45000 **-**66000 -11900 --1200000 **-**VDW MISC TOTAL BOUNDARY KINETIC 800 --710000 **-**74000 **-**265000 600 -100 -72000 **-**-720000 **-**264000 -400 -70000 -50 **-**263000 **-**-730000 **-**200 -68000 **-**Energy 305 262000 -POTENTIAL TOTAL3 TEMP TEMPAVG PRESSURE -710000 **-**304 -0 --980000 **-**-720000 · 303 **-**303 --400 **-**-990000 **-**302 **-**302 **-**-730000 **-**-800 -1000000 **-**301 **-**301 9e+05 0e+00 3e+05 6e+05 GPRESSURE VOLUME PRESSAVG GPRESSAVG 4400000 -0 -0 -0 -4300000 --250 **-**-250 **-**-400 **-**4200000 --500 **-**-500 **-**-800 **-**-750 **−750** • 4100000 --1000 **-** 100+00 -1000 **-** 10e+00 3e+05 9e+05 6e+05 9e+05 0e+00 3e+05 9e+05 3e+05 6e+05 9e+05

TIME STEPS

0e+00

6e+05

3e+05

6e+05