

```
; Stearic acid, SA.itp
; needs lipid.itp
; Created by Anna Akinshina, University of Huddersfield, 2016
;
;
;
;
;          C2H2  C4H2  C6H2  C8H2  C10H2  C12H2  C14H2  C16H2  O19
;          /  \ /  \ /  \ /  \ /  \ /  \ /  \ /  ||
; C1H3  C3H2  C5H2  C7H1  C9H2  C11H2  C13H2  C15H2  C17H2  C18-O20-H21
```

```
[ moleculetype ]
; name nrexcl
SA 3
```

```
[ atoms ]
; nr      type  resnr  resid  atom  cgnr  charge  mass
  1      LP3    1   SA    C1    1     0.000  15.0350
  2      LP2    1   SA    C2    2     0.000  14.0270
  3      LP2    1   SA    C3    3     0.000  14.0270
  4      LP2    1   SA    C4    4     0.000  14.0270
  5      LP2    1   SA    C5    5     0.000  14.0270
  6      LP2    1   SA    C6    6     0.000  14.0270
  7      LP2    1   SA    C7    7     0.000  14.0270
  8      LP2    1   SA    C8    8     0.000  14.0270
  9      LP2    1   SA    C9    9     0.000  14.0270
 10      LP2    1   SA   C10   10    0.000  14.0270
 11      LP2    1   SA   C11   11    0.000  14.0270
 12      LP2    1   SA   C12   12    0.000  14.0270
 13      LP2    1   SA   C13   13    0.000  14.0270
 14      LP2    1   SA   C14   14    0.000  14.0270
 15      LP2    1   SA   C15   15    0.000  14.0270
 16      LP2    1   SA   C16   16    0.000  14.0270
 17      LP2    1   SA   C17   17    0.000  14.0270
 18      C      1   SA   C18   18    0.530  12.0110
 19      O      1   SA   O19   18   -0.380  15.9994
 20      OA     1   SA   O20   18   -0.548  15.9994
 21      HO     1   SA   H21   18    0.398   1.0080
```

```
[ bonds ]
; ai  aj  func  b0      kb
  1  2  1  0.153  334700.0 ; C1  C2
  2  3  1  0.153  334700.0 ; C2  C3
  3  4  1  0.153  334700.0 ; C3  C4
  4  5  1  0.153  334700.0 ; C4  C5
  5  6  1  0.153  334700.0 ; C5  C6
  6  7  1  0.153  334700.0 ; C6  C7
  7  8  1  0.153  334700.0 ; C7  C8
  8  9  1  0.153  334700.0 ; C8  C9
  9 10  1  0.153  334700.0 ; C9  C10
 10 11  1  0.153  334700.0 ; C10 C11
 11 12  1  0.153  334700.0 ; C11 C12
 12 13  1  0.153  334700.0 ; C12 C13
 13 14  1  0.153  334700.0 ; C13 C14
 14 15  1  0.153  334700.0 ; C14 C15
 15 16  1  0.153  334700.0 ; C15 C16
 16 17  1  0.153  334700.0 ; C16 C17
 17 18  1  0.153  334700.0 ; C17 C18
 18 19  1  0.123  502080.0 ; C18 O19 C=O
 18 20  1  0.136  376560.0 ; C18 O20 C-OA
 20 21  1  0.100  313800.0 ; O20 H21 OA-HO
```

[ pairs ]

```
; ai aj func
 15 18 1 ; C15 C18 CH2-C
 16 19 1 ; C16 O19 CH2-O
 16 20 1 ; C16 O20 CH2-OA
 17 21 1 ; C17 H21 CH2-HO
```

[ angles ]

```
; ai aj ak func theta0 ktheta
 1 2 3 1 111.0 460.20
 2 3 4 1 111.0 460.20
 3 4 5 1 111.0 460.20
 4 5 6 1 111.0 460.20
 5 6 7 1 111.0 460.20
 6 7 8 1 111.0 460.20
 7 8 9 1 111.0 460.20
 8 9 10 1 111.0 460.20
 9 10 11 1 111.0 460.20
 10 11 12 1 111.0 460.20
 11 12 13 1 111.0 460.20
 12 13 14 1 111.0 460.20
 13 14 15 1 111.0 460.20
 14 15 16 1 111.0 460.20
 15 16 17 1 111.0 460.20
 16 17 18 1 111.0 460.20
 17 18 19 1 121.0 502.080 ; O-C-CH2
 17 18 20 1 115.0 502.080 ; OA-C-CH2
 20 18 19 1 124.0 502.080 ; OA-C-O
 18 20 21 1 109.5 397.480 ; HO-OA-C
```

[ dihedrals ]

```
; ai aj ak al fn phi0 kphi mult
 1 2 3 4 3
 2 3 4 5 3
 3 4 5 6 3
 4 5 6 7 3
 5 6 7 8 3
 6 7 8 9 3
 7 8 9 10 3
 8 9 10 11 3
 9 10 11 12 3
 10 11 12 13 3
 11 12 13 14 3
 12 13 14 15 3
 13 14 15 16 3
 14 15 16 17 3
 15 16 17 18 1 0.0 5.858 3
 16 17 18 20 1 0.0 0.42 6
 16 17 18 19 1 0.0 0.42 6
 17 18 20 21 1 180.0 16.736 2
 19 18 20 21 1 180.0 16.736 2
```

; improper dihedral

```
18 20 17 19 2 0.0 167.360 ; head
```