

SUPPLEMENTARY MATERIAL

Atomistic Insights into Dynamics of Binary Collisions between Gaseous

Molecules and Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Dimers

Qian Mao, a Juan Zhou, a Kai H. Luo*^{a,b} and Adri C. T. van Duin^c

1. Reactive MD-force field: C/H/O/N

Reactive MD-force field: C-2013 with N2

39 ! Number of general parameters
50.0000 !p(boc1)
9.5469 !p(boc2)
26.5405 !p(coa2)
1.9940 !p(trip4)
2.3157 !p(trip3)
70.0000 !kc2
1.0588 !p(ovun6)
4.6000 !p(trip2)
12.1176 !p(ovun7)
13.3056 !p(ovun8)
-101.4874 !p(trip1)
0.0000 !Lower Taper-radius (swa)
10.0000 !Upper Taper-radius (swb)
0.0000 !not used
33.8667 !p(val7)
6.0891 !p(lp1)
1.0563 !p(val9)
2.0384 !p(val10)
6.1431 !not used
6.9290 !p(pen2)
0.3989 !p(pen3)
3.9954 !p(pen4)
0.0000 !not used
5.7796 !p(tor2)
10.0000 !p(tor3)
1.9487 !p(tor4)
0.0000 !not used
2.1645 !p(cot2)
1.5591 !p(vdW1)
0.1000 !Cutoff for bond order*100 (cutoff)
2.1365 !p(coa4)
0.6991 !p(ovun4)

50.0000 !p(ovun3)
 1.8512 !p(val8)
 0.0000 !not used
 0.0000 !not used
 0.0000 !not used
 0.0000 !not used
 2.6962 !p(coa3)

5 ! Nr of atoms; atomID;ro(sigma); Val;atom mass;Rvdw;Dij;gamma
 alfa;gamma(w);Val(angle);p(ovun5);n.u.;chiEEM;etaEEM;n.u.
 ro(pipi);p(lp2);Heat increment;p(boc4);p(boc3);p(boc5),n.u.;n.u.
 p(ovun2);p(val3);n.u.;Val(boc);p(val5);n.u.;n.u.;n.u.

C 1.3674 4.0000 12.0000 2.0453 0.1444 0.7920 1.1706 4.0000
 9.0000 1.5000 4.0000 27.5134 79.5548 6.7897 6.0000 0.0000
 1.1168 0.0000 181.0000 14.2732 24.4406 6.7313 0.8563 0.0000
 -4.1021 5.0000 1.0564 4.0000 2.9663 1.0000 0.1000 10.0000

H 0.8549 1.0000 1.0080 1.3348 0.0740 1.0000 -0.1000 1.0000
 9.1622 5.0518 1.0000 0.0000 121.1250 6.4991 9.5627 1.0000
 -0.1000 0.0000 62.4879 2.5194 2.3785 0.2339 1.0698 0.0000
 -15.7683 2.1488 1.0338 1.0000 2.8793 0.1000 0.0100 10.0000

O 1.2000 2.0000 15.9990 1.4972 0.1320 1.0000 1.0981 6.0000
 10.3545 7.7719 4.0000 28.8967 116.0768 8.5000 6.6384 2.0000
 1.0479 20.0000 60.8726 10.0338 2.2024 0.9942 0.9745 0.0000
 -3.6141 2.7025 1.0493 4.0000 2.9225 0.1000 0.0100 10.0000

N 1.7135 3.0000 14.0000 1.7882 0.1168 0.8596 1.3594 5.0000
 9.0320 26.8500 4.0000 36.6796 100.0000 6.8418 6.3404 2.0000
 1.1315 27.5779 119.9837 0.8955 2.1588 0.5047 0.9745 0.0000
 -2.8706 1.5000 1.0183 4.0000 2.8793 1.3725 1.1765 12.6959

Ar -0.1000 2.0000 39.9480 1.9200 0.3200 0.5000 -0.1000 4.0000
 12.0000 4.0000 4.0000 0.0000 0.0000 5.0000 93.0000 0.0000
 -0.1000 0.0000 -2.3700 6.4918 8.5961 0.2368 0.8563 0.0000
 -5.0000 3.1873 1.0338 6.2998 2.5791 1.0000 0.1000 10.0000

10 ! Nr of bonds; at1;at2;De(sigma);De(pi);De(pipi);p(be1);p(b
 p(be2);p(bo3);p(bo4);n.u.;p(bo1);p(bo2)

1 1 80.8865 107.9944 52.0636 0.5218 -0.3636 1.0000 34.9876 0.7769
 6.1244 -0.1693 8.0804 1.0000 -0.0586 8.1850 1.0000 0.0000

1 2 155.4035 0.0000 0.0000 -0.4842 0.0000 1.0000 6.0000 0.5227
 5.7899 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0650 7.1874 0.0000 0.0000

2 2 147.0819 0.0000 0.0000 -0.1197 0.0000 1.0000 6.0000 0.9218
 3.6481 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0847 5.1855 0.0000 0.0000

1 3 165.9435 85.4503 100.1109 -0.9994 -0.2558 1.0000 13.5580 0.3312
 0.7529 -0.2191 7.8022 1.0000 -0.1263 4.5642 0.0000 0.0000

3 3 56.8089 135.0587 51.4085 0.7427 -0.3349 1.0000 29.4362 0.9908
 0.7670 -0.1581 7.0000 1.0000 -0.2498 6.1492 1.0000 0.0000

2 3 201.1444 0.0000 0.0000 -1.0000 0.0000 1.0000 6.0000 0.6404
 1.4478 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0814 4.5180 0.0000 0.0000

1 4 164.5457 195.8453 116.6134 -0.6879 -0.3831 1.0000 29.3189 0.2244

```

0.4718 -0.3087 7.0000 1.0000 -0.1000 6.3697 1.0000 0.0000
2 4 154.4029 0.0000 0.0000 0.0526 0.0000 1.0000 6.0000 2.0000
10.2061 1.0000 0.0000 1.0000 -0.2000 5.7682 0.0000 0.0000
3 4 130.8596 169.4551 40.0000 0.3837 -0.1639 1.0000 35.0000 0.2000
1.0000 -0.3579 7.0004 1.0000 -0.1193 6.8773 1.0000 0.0000
4 4 46.0628 106.4695 161.7748 -0.2433 -0.2435 1.0000 12.1726 2.0000
2.0000 -0.3827 7.2598 1.0000 -0.2000 7.0000 1.0000 0.0000
6 ! Nr of off-diagonal terms. at1;at2;Dij;RvdW;alfa;ro(sigma);r
1 2 0.1729 1.4000 9.5343 1.1464 -1.0000 -1.0000
2 3 0.0418 1.7105 10.1002 0.8848 -1.0000 -1.0000
1 3 0.1131 1.8523 9.8442 1.2775 1.1342 1.0621
1 4 0.1524 2.1210 9.9846 1.5000 1.2027 1.1367
2 4 0.0208 1.8539 10.2569 1.1308 -1.0000 -1.0000
3 4 0.1048 2.0003 10.1220 1.3173 1.1096 1.0206
40 ! Nr of angles. at1;at2;at3;Thetao;p(val1);p(val2);p(coal);
1 1 1 74.9085 44.7514 0.9144 0.0000 0.0050 0.3556 2.5715
1 1 2 70.6674 19.0818 7.0000 0.0000 0.3215 1.7508 1.8816
2 1 2 64.8758 16.7592 2.3077 0.0000 0.0050 0.0000 3.0000
1 2 2 0.0000 0.0000 6.0000 0.0000 0.0000 0.0000 1.0400
1 2 1 0.0000 3.4110 7.7350 0.0000 0.0000 0.0000 1.0400
2 2 2 0.0000 27.9213 5.8635 0.0000 0.0000 0.0000 1.0400
1 1 3 14.6692 8.0402 6.6703 0.0000 1.9908 41.1637 2.6861
3 1 3 73.9682 36.2412 4.8833 -36.6624 2.7686 0.1000 2.0608
2 1 3 65.0000 23.8232 0.3030 0.0000 2.0299 0.0000 1.0010
1 3 1 76.9554 17.8032 3.2786 0.0000 0.6849 0.0000 1.8077
1 3 3 81.2941 33.9813 7.0000 0.0000 0.1396 51.4201 1.9703
3 3 3 78.2628 28.9418 1.8277 0.0000 1.8461 50.0000 2.8712
1 3 2 82.9640 32.4874 0.8777 0.0000 0.9627 0.0000 1.0010
2 3 3 81.3316 43.7500 2.3121 0.0000 2.1826 0.0000 1.0010
2 3 2 71.9737 21.1570 6.5232 0.0000 2.7537 0.0000 1.0010
1 2 3 0.0000 45.0000 2.5000 0.0000 1.0000 0.0000 1.0010
3 2 3 0.0000 0.0148 6.0000 0.0000 0.0000 0.0000 1.0400
2 2 3 0.0000 9.7025 6.0000 0.0000 0.0000 0.0000 1.0400
1 1 4 73.2234 35.5013 0.6485 0.0000 2.9500 50.0000 1.0000
2 1 4 60.4559 44.7932 1.7847 0.0000 0.7267 0.0000 3.9739
3 1 4 73.9544 12.4661 7.0000 0.0000 3.0000 0.0000 1.1880
4 1 4 46.0875 30.6300 3.4987 0.0000 0.1000 0.0000 1.1226
1 3 4 82.4890 31.4554 0.9953 0.0000 1.6310 0.0000 1.0783
2 3 4 75.6201 18.7919 0.9833 0.0000 0.1218 0.0000 1.0500
3 3 4 84.3637 31.4554 0.9953 0.0000 1.6310 0.0000 1.0783
4 3 4 89.7071 31.4554 0.9953 0.0000 1.6310 0.0000 1.1519
1 4 1 67.9072 44.8886 0.7098 0.0000 3.0000 0.0000 1.0000
1 4 2 82.8293 32.3080 2.5022 0.0000 0.1000 0.0000 3.1908
1 4 3 103.3204 33.0381 0.5787 0.0000 1.6777 0.0000 1.0500
1 4 4 74.5963 32.3569 1.4914 0.0000 3.0000 0.0000 2.2238
2 4 2 90.0000 22.8156 8.0000 0.0000 0.4644 0.0000 4.0000

```

2	4	3	81.3686	40.0712	2.2396	0.0000	0.0222	0.0000	1.0369	
2	4	4	73.0275	40.7415	2.4235	0.0000	0.3567	0.0000	1.7715	
3	4	3	74.1978	42.1786	1.7845	-18.0069	1.6777	0.0000	1.0500	
3	4	4	74.8600	43.7354	1.1572	-0.9193	1.6777	0.0000	1.0500	
4	4	4	90.0000	34.3895	0.2241	0.0000	3.0000	0.0000	1.3194	
1	2	4	0.0000	5.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
2	2	4	0.0000	5.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
3	2	4	0.0000	5.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
4	2	4	0.0000	5.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
31	! Nr of torsions. at1;at2;at3;at4;;V1;V2;V3;p(tor1);p(cot1);n									
1	1	1	1	2.1207	26.8713	0.5160	-9.0000	-2.8394	0.0000	0.0000
1	1	1	2	1.9234	29.9439	0.6347	-3.9601	-1.1372	0.0000	0.0000
2	1	1	2	1.8177	20.0133	0.3898	-2.7239	-3.0000	0.0000	0.0000
1	1	1	3	-2.5000	16.0909	0.8561	-2.9922	-1.5096	0.0000	0.0000
2	1	1	3	-0.1328	29.1497	0.1350	-4.3756	-1.1407	0.0000	0.0000
3	1	1	3	-2.5000	11.7195	-0.1136	-7.4163	-1.0243	0.0000	0.0000
1	1	3	1	0.2327	14.1039	-0.7325	-6.6628	-3.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	2	-2.5000	77.5839	0.0441	-4.8657	-2.6220	0.0000	0.0000
2	1	3	1	-0.2763	80.0000	1.0000	-4.6742	-3.0000	0.0000	0.0000
2	1	3	2	-2.1745	74.0676	0.3125	-6.0033	-1.0031	0.0000	0.0000
1	1	3	3	0.8822	5.0000	0.9750	-6.1534	-1.0000	0.0000	0.0000
2	1	3	3	-2.5000	80.0000	1.0000	-3.4951	-3.0000	0.0000	0.0000
3	1	3	1	-2.5000	80.0000	-1.0000	-4.2539	-2.9835	0.0000	0.0000
3	1	3	2	-0.7034	68.2301	1.0000	-7.4244	-1.8988	0.0000	0.0000
3	1	3	3	-2.5000	55.4254	0.5431	-4.0913	-2.3982	0.0000	0.0000
1	3	3	1	2.4101	0.1000	-0.3571	-4.9721	-1.0250	0.0000	0.0000
1	3	3	2	-0.4590	14.5816	-0.5244	-2.7794	-2.7997	0.0000	0.0000
2	3	3	2	2.3290	5.9006	0.9942	-2.7718	-1.1997	0.0000	0.0000
1	3	3	3	-0.9960	0.1000	0.9833	-4.2868	-1.0036	0.0000	0.0000
2	3	3	3	1.7004	0.1000	0.3411	-2.6535	-1.0000	0.0000	0.0000
3	3	3	3	-2.5000	0.1000	1.0000	-5.1669	-1.0000	0.0000	0.0000
0	1	2	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	2	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	3	0	0.0000	0.1000	0.0200	-2.5415	0.0000	0.0000	0.0000
0	1	1	0	0.0000	14.4292	1.0000	-6.8518	-2.0000	0.0000	0.0000
0	3	3	0	0.5511	25.4150	1.1330	-5.1903	-1.0000	0.0000	0.0000
4	4	4	4	-0.0100	21.2476	1.0000	-8.0000	-0.0100	0.0000	0.0000
0	1	4	0	-1.1420	5.8603	-0.2035	-4.8443	-1.6622	0.0000	0.0000
0	2	4	0	0.0000	0.1000	0.0200	-2.5415	0.0000	0.0000	0.0000
0	3	4	0	1.4816	55.6641	0.0004	-7.0465	-2.7831	0.0000	0.0000
0	4	4	0	-0.3244	27.7086	0.0039	-2.8272	-2.0000	0.0000	0.0000
4	! Nr of hydrogen bonds. at1;at2;at3;r(hb);p(hb1);p(hb2);p(hb3)									
3	2	3	1.9682	-2.0000	2.0000	15.0000				
3	2	4	2.0000	-2.0000	2.0000	15.0000				
4	2	3	2.0000	-2.0000	2.0000	15.0000				
4	2	4	2.0000	-2.0000	2.0000	15.0000				