

Supplementary Materials

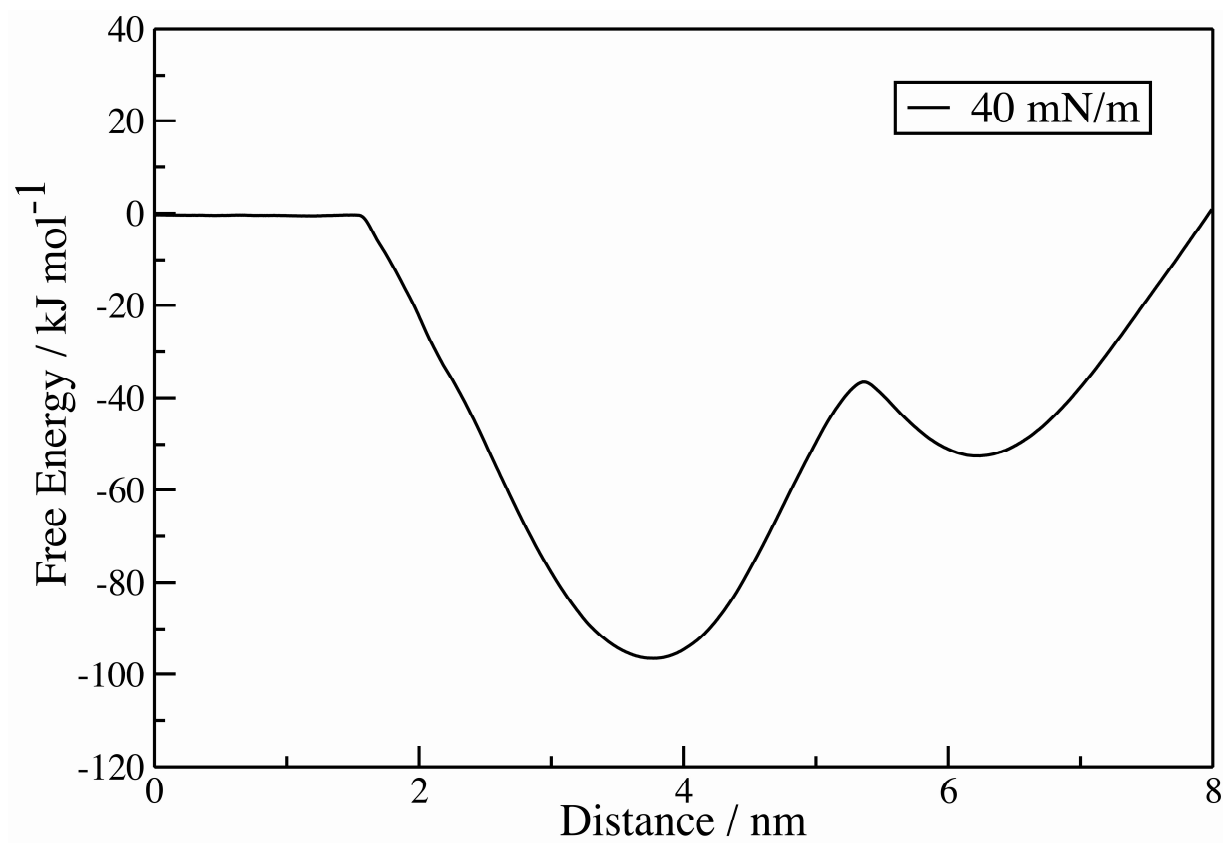


Figure S1: PMF for DPPC at 40mN/m surface tension in the low cholesterol system, from CG simulations with 132 lipids/monolayer

Topologies

These are the topology files for DPPC and POPG from the atomistic lipid force-field used.

DPPC

```
; autogenerated by genitp_new,
; please check the charges and cgnr
[ moleculetype ]
; Name nrexcl
DPPC      3
```

[atoms]

```
; n atype resnr residu atom cgnr charge mass ; code
 1 LC3 1 DPPC C31 0 0.3000 15.0350 ; 126
 2 LNL 1 DPPC N1 0 -0.3000 14.0067 ; 155
 3 LC3 1 DPPC C32 0 0.3000 15.0350 ; 126
 4 LC3 1 DPPC C33 0 0.3000 15.0350 ; 126
 5 LC2 1 DPPC C21 0 0.2500 14.0270 ; 123
 6 LC2 1 DPPC C22 1 0.3200 14.0270 ; 125
 7 LOS 1 DPPC O1 1 -0.8200 15.9994 ; 157
 8 LP 1 DPPC P1 1 2.2200 30.9738 ; 124
 9 LOM 1 DPPC O2 1 -1.0200 15.9994 ; 156
10 LOM 1 DPPC O3 1 -1.0200 15.9994 ; 156
11 LOS 1 DPPC O4 1 -0.8000 15.9994 ; 162
12 LC2 1 DPPC C23 2 0.4600 14.0067 ; 120
13 LH1 1 DPPC C11 2 0.2700 13.0190 ; 119
14 LOS 1 DPPC O5 2 -0.6600 15.9994 ; 148
15 LC 1 DPPC C01 2 0.8900 12.0110 ; 102
16 LO 1 DPPC O6 2 -0.6900 15.9994 ; 147
17 LC2 1 DPPC C24 3 0.4600 14.0067 ; 120
18 LOS 1 DPPC O7 3 -0.6600 15.9994 ; 148
19 LC 1 DPPC C02 3 0.8900 12.0110 ; 102
20 LO 1 DPPC O8 3 -0.6900 15.9994 ; 147
21 LP2 1 DPPC C25 4 0.0000 14.0270 ; 138
22 LP2 1 DPPC C26 5 0.0000 14.0270 ; 138
23 LP2 1 DPPC C27 6 0.0000 14.0270 ; 138
24 LP2 1 DPPC C28 7 0.0000 14.0270 ; 138
25 LP2 1 DPPC C29 8 0.0000 14.0270 ; 138
26 LP2 1 DPPC C210 9 0.0000 14.0270 ; 138
27 LP2 1 DPPC C211 10 0.0000 14.0270 ; 138
28 LP2 1 DPPC C212 11 0.0000 14.0270 ; 138
29 LP2 1 DPPC C213 12 0.0000 14.0270 ; 138
30 LP2 1 DPPC C214 13 0.0000 14.0270 ; 138
31 LP2 1 DPPC C215 14 0.0000 14.0270 ; 138
32 LP2 1 DPPC C216 15 0.0000 14.0270 ; 138
33 LP2 1 DPPC C217 16 0.0000 14.0270 ; 138
34 LP2 1 DPPC C218 17 0.0000 14.0270 ; 138
```

35	LP3	1	DPPC	C34	18	0.0000	15.0350 ; 139
36	LP2	1	DPPC	C219	19	0.0000	14.0270 ; 138
37	LP2	1	DPPC	C220	20	0.0000	14.0270 ; 138
38	LP2	1	DPPC	C221	21	0.0000	14.0270 ; 138
39	LP2	1	DPPC	C222	22	0.0000	14.0270 ; 138
40	LP2	1	DPPC	C223	23	0.0000	14.0270 ; 138
41	LP2	1	DPPC	C224	24	0.0000	14.0270 ; 138
42	LP2	1	DPPC	C225	25	0.0000	14.0270 ; 138
43	LP2	1	DPPC	C226	26	0.0000	14.0270 ; 138
44	LP2	1	DPPC	C227	27	0.0000	14.0270 ; 138
45	LP2	1	DPPC	C228	28	0.0000	14.0270 ; 138
46	LP2	1	DPPC	C229	29	0.0000	14.0270 ; 138
47	LP2	1	DPPC	C230	30	0.0000	14.0270 ; 138
48	LP2	1	DPPC	C231	31	0.0000	14.0270 ; 138
49	LP2	1	DPPC	C232	32	0.0000	14.0270 ; 138
50	LP3	1	DPPC	C35	33	0.0000	15.0350 ; 139

[bonds]

;	i	j	function	;	bonds	code	
	1	2	1	0.14700E+00	0.37450E+06	;LC3 LNL	19530
	2	3	1	0.14700E+00	0.37450E+06	;LNL LC3	19530
	2	4	1	0.14700E+00	0.37450E+06	;LNL LC3	19530
	2	5	1	0.14700E+00	0.37450E+06	;LNL LC2	19065
	5	6	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LC2 LC2	15375
	6	7	1	0.14300E+00	0.25100E+06	;LC2 LOS	19625
	7	8	1	0.16100E+00	0.25100E+06	;LOS LP	19468
	8	9	1	0.14800E+00	0.37660E+06	;LP LOM	19344
	8	10	1	0.14800E+00	0.37660E+06	;LP LOM	19344
	8	11	1	0.16100E+00	0.25100E+06	;LP LOS	20088
	11	12	1	0.14300E+00	0.25100E+06	;LOS LC2	19440
	12	13	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LC2 LH1	14280
	13	14	1	0.14350E+00	0.25100E+06	;LH1 LOS	17612
	13	17	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LH1 LC2	14280
	14	15	1	0.14350E+00	0.25100E+06	;LOS LC	15096
	15	16	1	0.12300E+00	0.50210E+06	;LC LO	14994
	15	36	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LC LP2	14076
	17	18	1	0.14350E+00	0.25100E+06	;LC2 LOS	17760
	18	19	1	0.14350E+00	0.25100E+06	;LOS LC	15096
	19	20	1	0.12300E+00	0.50210E+06	;LC LO	14994
	19	21	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LC LP2	14076
	21	22	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
	22	23	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
	23	24	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
	24	25	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
	25	26	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
	26	27	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044

27	28	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
28	29	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
29	30	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
30	31	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
31	32	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
32	33	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
33	34	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
34	35	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP3	19182
36	37	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
37	38	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
38	39	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
39	40	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
40	41	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
41	42	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
42	43	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
43	44	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
44	45	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
45	46	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
46	47	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
47	48	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
48	49	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
49	50	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP3	19182

[pairs]

; i j function

1	6	1
2	7	1
3	6	1
4	6	1
5	8	1
6	9	1
6	10	1
6	11	1
7	12	1
8	13	1
9	12	1
10	12	1
11	14	1
11	17	1
12	15	1
12	18	1
13	16	1
13	36	1
13	19	1
14	18	1
14	37	1

15 17 1
16 37 1
17 20 1
17 21 1
18 22 1
20 22 1

[angles]

; i	j	k	function	; angles	code
1	2	3	1	0.10950E+03 0.33470E+03	;LC3 LNL LC3 116031
1	2	4	1	0.10950E+03 0.33470E+03	;LC3 LNL LC3 116031
1	2	5	1	0.10950E+03 0.37660E+03	;LC3 LNL LC2 115653
2	5	6	1	0.10950E+03 0.46020E+03	;LNL LC2 LC2 119498
3	2	4	1	0.10950E+03 0.33470E+03	;LC3 LNL LC3 116031
3	2	5	1	0.10950E+03 0.37660E+03	;LC3 LNL LC2 115653
4	2	5	1	0.10950E+03 0.37660E+03	;LC3 LNL LC2 115653
5	6	7	1	0.10950E+03 0.46020E+03	;LC2 LC2 LOS 119436
6	7	8	1	0.12000E+03 0.39750E+03	;LC2 LOS LP 115657
7	8	9	1	0.10950E+03 0.39750E+03	;LOS LP LOM 124616
7	8	10	1	0.10950E+03 0.39750E+03	;LOS LP LOM 124616
7	8	11	1	0.10300E+03 0.39750E+03	;LOS LP LOS 125558
8	11	12	1	0.12000E+03 0.39750E+03	;LP LOS LC2 115042
9	8	10	1	0.12000E+03 0.58580E+03	;LOM LP LOM 124460
9	8	11	1	0.10960E+03 0.39750E+03	;LOM LP LOS 125396
10	8	11	1	0.10960E+03 0.39750E+03	;LOM LP LOS 125396
11	12	13	1	0.11100E+03 0.46020E+03	;LOS LC2 LH1 119398
12	13	14	1	0.10950E+03 0.46020E+03	;LC2 LH1 LOS 117879
12	13	17	1	0.10950E+03 0.46020E+03	;LC2 LH1 LC2 114519
13	14	15	1	0.12000E+03 0.41840E+03	;LH1 LOS LC 112286
13	17	18	1	0.11100E+03 0.46020E+03	;LH1 LC2 LOS 117732
14	13	17	1	0.10950E+03 0.46020E+03	;LOS LH1 LC2 117879
14	15	16	1	0.12400E+03 0.50210E+03	;LOS LC LO 121858
14	15	36	1	0.11500E+03 0.50210E+03	;LOS LC LP2 120526
15	36	37	1	0.11100E+03 0.46020E+03	;LC LP2 LP2 114214
16	15	36	1	0.12100E+03 0.50210E+03	;LO LC LP2 120388
17	18	19	1	0.11100E+03 0.46020E+03	;LC2 LOS LC 112388
18	19	20	1	0.12400E+03 0.50210E+03	;LOS LC LO 121858
18	19	21	1	0.11500E+03 0.50210E+03	;LOS LC LP2 120526
19	21	22	1	0.11100E+03 0.46020E+03	;LC LP2 LP2 114214
20	19	21	1	0.12100E+03 0.50210E+03	;LO LC LP2 120388
21	22	23	1	0.11100E+03 0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
22	23	24	1	0.11100E+03 0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
23	24	25	1	0.11100E+03 0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
24	25	26	1	0.11100E+03 0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
25	26	27	1	0.11100E+03 0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
26	27	28	1	0.11100E+03 0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182

27	28	29	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
28	29	30	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
29	30	31	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
30	31	32	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
31	32	33	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
32	33	34	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
33	34	35	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP3	119320
36	37	38	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
37	38	39	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
38	39	40	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
39	40	41	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
40	41	42	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
41	42	43	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
42	43	44	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
43	44	45	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
44	45	46	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
45	46	47	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
46	47	48	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
47	48	49	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
48	49	50	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP3	119320

[dihedrals]

; i	j	k	l	funct	phi0	cp	mult	; dihedral angles	code
1	2	5	6	1	0.0	3.76	3	;LC3 LNL LC2 LC2	11922250
2	5	6	7	1	0.0	5.85	3	;LNL LC2 LC2 LOS	11561835
5	6	7	8	1	0.0	3.76	3	;LC2 LC2 LOS LP	11977752
6	7	8	11	1	0.0	3.14	2	;LC2 LOS LP LOS	11967050
6	7	8	11	1	0.0	1.05	3	;LC2 LOS LP LOS	11967050
7	8	11	12	1	0.0	3.14	2	;LOS LP LOS LC2	12027640
7	8	11	12	1	0.0	1.05	3	;LOS LP LOS LC2	12027640
8	11	12	13	1	0.0	3.76	3	;LP LOS LC2 LH1	11958756
11	12	13	14	1	0.0	2.09	2	;LOS LC2 LH1 LOS	11451976
11	12	13	17	1	0.0	5.85	3	;LOS LC2 LH1 LC2	11447440
11	12	13	17	1	0.0	0.42	2	;LOS LC2 LH1 LC2	11447440
12	13	14	15	1	0.0	3.77	3	;LC2 LH1 LOS LC	11773440
12	13	17	18	1	0.0	5.85	3	;LC2 LH1 LC2 LOS	11445760
12	13	17	18	1	0.0	0.42	2	;LC2 LH1 LC2 LOS	11445760
13	14	15	36	1	180.0	16.74	2	;LH1 LOS LC LP2	11526022
13	17	18	19	1	0.0	3.77	3	;LH1 LC2 LOS LC	11788138
14	15	36	37	1	0.0	0.42	6	;LOS LC LP2 LP2	11428024
15	36	37	38	3	;			;LC LP2 LP2 LP2	31918476
17	18	19	21	1	180.0	16.74	2	;LC2 LOS LC LP2	11526160
18	19	21	22	1	0.0	0.42	6	;LOS LC LP2 LP2	11428024
19	21	22	23	3	;			;LC LP2 LP2 LP2	31918476
21	22	23	24	3	;			;LP2 LP2 LP2 LP2	31923444
22	23	24	25	3	;			;LP2 LP2 LP2 LP2	31923444

```

23 24 25 26 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
24 25 26 27 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
25 26 27 28 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
26 27 28 29 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
27 28 29 30 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
28 29 30 31 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
29 30 31 32 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
30 31 32 33 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
31 32 33 34 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
32 33 34 35 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP3 31923582
36 37 38 39 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
37 38 39 40 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
38 39 40 41 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
39 40 41 42 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
40 41 42 43 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
41 42 43 44 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
42 43 44 45 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
43 44 45 46 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
44 45 46 47 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
45 46 47 48 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
46 47 48 49 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
47 48 49 50 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP3 31923582

```

[dihedrals]

```

; i j k l funct ; dihedral angles code
13 12 14 17 2 0.35264E+02 0.33470E+03 ;LH1 LC2 LOS LC2 21190000
15 14 16 36 2 0.00000E+00 0.16740E+03 ;LC LOS LO LP2 21020000
19 18 20 21 2 0.00000E+00 0.16740E+03 ;LC LOS LO LP2 21020000

```

; Include Position restraint file

```

#ifdef POSRES_DPPC
#include "posre_DPPC.itp"
#endif

```

POPG

```

;autogenerated by genitp_new,
; please check the charges and cgnr

```

[moleculetype]

; Name nrexcl

POPG 3

[atoms]

```

; n atype resnr residu atom cgnr charge mass ; code
1 H 1 POPG H1 0 0.4000 1.0080 ; 112
2 LOS 1 POPG O1 0 -0.7600 15.9994 ; 159
3 LC2 1 POPG C21 0 0.3200 14.0270 ; 125

```

4	LH1	1	POPG	C11	0	0.2500	13.0190 ; 146
5	LOS	1	POPG	O2	0	-0.7600	15.9994 ; 159
6	H	1	POPG	H2	0	0.4000	1.0080 ; 112
7	LC2	1	POPG	C22	1	0.3200	14.0270 ; 125
8	LOS	1	POPG	O3	1	-0.8200	15.9994 ; 157
9	LP	1	POPG	P1	1	2.2200	30.9738 ; 124
10	LOM	1	POPG	O4	1	-1.0200	15.9994 ; 156
11	LOM	1	POPG	O5	1	-1.0200	15.9994 ; 156
12	LOS	1	POPG	O6	1	-0.8000	15.9994 ; 162
13	LC2	1	POPG	C23	2	0.4600	14.0067 ; 120
14	LH1	1	POPG	C12	2	0.2700	13.0190 ; 119
15	LOS	1	POPG	O7	2	-0.6600	15.9994 ; 148
16	LC	1	POPG	C01	2	0.8900	12.0110 ; 102
17	LO	1	POPG	O8	2	-0.6900	15.9994 ; 147
18	LC2	1	POPG	C24	3	0.4600	14.0067 ; 120
19	LOS	1	POPG	O9	3	-0.6600	15.9994 ; 148
20	LC	1	POPG	C02	3	0.8900	12.0110 ; 102
21	LO	1	POPG	O10	3	-0.6900	15.9994 ; 147
22	LP2	1	POPG	C25	4	0.0000	14.0270 ; 138
23	LP2	1	POPG	C26	5	0.0000	14.0270 ; 138
24	LP2	1	POPG	C27	6	0.0000	14.0270 ; 138
25	LP2	1	POPG	C28	7	0.0000	14.0270 ; 138
26	LP2	1	POPG	C29	8	0.0000	14.0270 ; 138
27	LP2	1	POPG	C210	9	0.0000	14.0270 ; 138
28	LP2	1	POPG	C211	10	0.0000	14.0270 ; 138
29	LP2	1	POPG	C212	11	0.0000	14.0270 ; 138
30	LP2	1	POPG	C213	12	0.0000	14.0270 ; 138
31	LP2	1	POPG	C214	13	0.0000	14.0270 ; 138
32	LP2	1	POPG	C215	14	0.0000	14.0270 ; 138
33	LP2	1	POPG	C216	15	0.0000	14.0270 ; 138
34	LP2	1	POPG	C217	16	0.0000	14.0270 ; 138
35	LP2	1	POPG	C218	17	0.0000	14.0270 ; 138
36	LP3	1	POPG	C31	18	0.0000	15.0350 ; 139
37	LP2	1	POPG	C219	19	0.0000	14.0270 ; 138
38	LP2	1	POPG	C220	20	0.0000	14.0270 ; 138
39	LP2	1	POPG	C221	21	0.0000	14.0270 ; 138
40	LP2	1	POPG	C222	22	0.0000	14.0270 ; 138
41	LP2	1	POPG	C223	23	0.0000	14.0270 ; 138
42	LP2	1	POPG	C224	24	0.0000	14.0270 ; 138
43	LP2	1	POPG	C225	25	0.0000	14.0270 ; 138
44	LH1	1	POPG	C13	26	0.0000	13.0190 ; 137
45	LH1	1	POPG	C14	27	0.0000	13.0190 ; 137
46	LP2	1	POPG	C226	28	0.0000	14.0270 ; 138
47	LP2	1	POPG	C227	29	0.0000	14.0270 ; 138
48	LP2	1	POPG	C228	30	0.0000	14.0270 ; 138
49	LP2	1	POPG	C229	31	0.0000	14.0270 ; 138

50 LP2 1 POPG C230 32 0.0000 14.0270 ; 138
51 LP2 1 POPG C231 33 0.0000 14.0270 ; 138
52 LP2 1 POPG C232 34 0.0000 14.0270 ; 138
53 LP3 1 POPG C32 35 0.0000 15.0350 ; 139

[bonds]

; i	j	function		; bonds	code	
1	2	1	0.10000E+00	0.37450E+06	;H LOS	17808
2	3	1	0.14300E+00	0.25100E+06	;LOS LC2	19875
3	4	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LC2 LH1	18250
4	5	1	0.14300E+00	0.25100E+06	;LH1 LOS	23214
4	7	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LH1 LC2	18250
5	6	1	0.10000E+00	0.37450E+06	;LOS H	17808
7	8	1	0.14300E+00	0.25100E+06	;LC2 LOS	19625
8	9	1	0.16100E+00	0.25100E+06	;LOS LP	19468
9	10	1	0.14800E+00	0.37660E+06	;LP LOM	19344
9	11	1	0.14800E+00	0.37660E+06	;LP LOM	19344
9	12	1	0.16100E+00	0.25100E+06	;LP LOS	20088
12	13	1	0.14300E+00	0.25100E+06	;LOS LC2	19440
13	14	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LC2 LH1	14280
14	15	1	0.14350E+00	0.25100E+06	;LH1 LOS	17612
14	18	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LH1 LC2	14280
15	16	1	0.14350E+00	0.25100E+06	;LOS LC	15096
16	17	1	0.12300E+00	0.50210E+06	;LC LO	14994
16	37	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LC LP2	14076
18	19	1	0.14350E+00	0.25100E+06	;LC2 LOS	17760
19	20	1	0.14350E+00	0.25100E+06	;LOS LC	15096
20	21	1	0.12300E+00	0.50210E+06	;LC LO	14994
20	22	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LC LP2	14076
22	23	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
23	24	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
24	25	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
25	26	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
26	27	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
27	28	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
28	29	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
29	30	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
30	31	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
31	32	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
32	33	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
33	34	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
34	35	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
35	36	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP3	19182
37	38	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
38	39	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
39	40	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044

40	41	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
41	42	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
42	43	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
43	44	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LH1	18906
44	45	1	0.13900E+00	0.41840E+06	;LH1 LH1	18769
45	46	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LH1 LP2	18906
46	47	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
47	48	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
48	49	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
49	50	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
50	51	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
51	52	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP2	19044
52	53	1	0.15300E+00	0.33470E+06	;LP2 LP3	19182

[pairs]

; i j function

1	4	1
2	5	1
2	7	1
3	6	1
3	8	1
4	9	1
5	8	1
6	7	1
7	10	1
7	11	1
7	12	1
8	13	1
9	14	1
10	13	1
11	13	1
12	15	1
12	18	1
13	16	1
13	19	1
14	17	1
14	37	1
14	20	1
15	19	1
15	38	1
16	18	1
17	38	1
18	21	1
18	22	1
19	23	1
21	23	1

43 46 1

[angles]

; i	j	k	function		; angles	code
1	2	3	1	0.10950E+03	0.37660E+03	;H LOS LC2 114159
2	3	4	1	0.10950E+03	0.46020E+03	;LOS LC2 LH1 123339
3	4	5	1	0.10950E+03	0.46020E+03	;LC2 LH1 LOS 120021
3	4	7	1	0.10950E+03	0.46020E+03	;LC2 LH1 LC2 115771
4	5	6	1	0.10950E+03	0.33470E+03	;LH1 LOS H 116511
4	7	8	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LH1 LC2 LOS 123047
5	4	7	1	0.10950E+03	0.46020E+03	;LOS LH1 LC2 120021
7	8	9	1	0.12000E+03	0.39750E+03	;LC2 LOS LP 115657
8	9	10	1	0.10950E+03	0.39750E+03	;LOS LP LOM 124616
8	9	11	1	0.10950E+03	0.39750E+03	;LOS LP LOM 124616
8	9	12	1	0.10300E+03	0.39750E+03	;LOS LP LOS 125558
9	12	13	1	0.12000E+03	0.39750E+03	;LP LOS LC2 115042
10	9	11	1	0.12000E+03	0.58580E+03	;LOM LP LOM 124460
10	9	12	1	0.10960E+03	0.39750E+03	;LOM LP LOS 125396
11	9	12	1	0.10960E+03	0.39750E+03	;LOM LP LOS 125396
12	13	14	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LOS LC2 LH1 119398
13	14	15	1	0.10950E+03	0.46020E+03	;LC2 LH1 LOS 117879
13	14	18	1	0.10950E+03	0.46020E+03	;LC2 LH1 LC2 114519
14	15	16	1	0.12000E+03	0.41840E+03	;LH1 LOS LC 112286
14	18	19	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LH1 LC2 LOS 117732
15	14	18	1	0.10950E+03	0.46020E+03	;LOS LH1 LC2 117879
15	16	17	1	0.12400E+03	0.50210E+03	;LOS LC LO 121858
15	16	37	1	0.11500E+03	0.50210E+03	;LOS LC LP2 120526
16	37	38	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LC LP2 LP2 114214
17	16	37	1	0.12100E+03	0.50210E+03	;LO LC LP2 120388
18	19	20	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LC2 LOS LC 112388
19	20	21	1	0.12400E+03	0.50210E+03	;LOS LC LO 121858
19	20	22	1	0.11500E+03	0.50210E+03	;LOS LC LP2 120526
20	22	23	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LC LP2 LP2 114214
21	20	22	1	0.12100E+03	0.50210E+03	;LO LC LP2 120388
22	23	24	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
23	24	25	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
24	25	26	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
25	26	27	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
26	27	28	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
27	28	29	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
28	29	30	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
29	30	31	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
30	31	32	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
31	32	33	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
32	33	34	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182
33	34	35	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2 119182

34	35	36	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP3	119320
37	38	39	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
38	39	40	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
39	40	41	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
40	41	42	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
41	42	43	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
42	43	44	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LH1	119044
43	44	45	1	0.12100E+03	0.50208E+03	;LP2 LH1 LH1	119043
44	45	46	1	0.12100E+03	0.50208E+03	;LH1 LH1 LP2	119043
45	46	47	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LH1 LP2 LP2	119044
46	47	48	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
47	48	49	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
48	49	50	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
49	50	51	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
50	51	52	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP2	119182
51	52	53	1	0.11100E+03	0.46020E+03	;LP2 LP2 LP3	119320

[dihedrals]

; i	j	k	l	funct	phi0	cp	mult	; dihedral angles	code
1	2	3	4	1	0.0	1.255	3	;H LOS LC2 LH1	12003852
2	3	4	5	1	0.0	2.09	2	;LOS LC2 LH1 LOS	11850281
2	3	4	7	1	0.0	5.85	3	;LOS LC2 LH1 LC2	11844875
2	3	4	7	1	0.0	0.42	2	;LOS LC2 LH1 LC2	11844875
3	4	5	6	1	0.0	1.255	3	;LC2 LH1 LOS H	12335400
3	4	7	8	1	0.0	5.85	3	;LC2 LH1 LC2 LOS	11844625
3	4	7	8	1	0.0	0.42	2	;LC2 LH1 LC2 LOS	11844625
4	7	8	9	1	0.0	3.766	3	;LH1 LC2 LOS LP	11980604
7	8	9	12	1	0.0	3.14	2	;LC2 LOS LP LOS	11967050
7	8	9	12	1	0.0	1.05	3	;LC2 LOS LP LOS	11967050
8	9	12	13	1	0.0	3.14	2	;LOS LP LOS LC2	12027640
8	9	12	13	1	0.0	1.05	3	;LOS LP LOS LC2	12027640
9	12	13	14	1	0.0	3.76	3	;LP LOS LC2 LH1	11958756
12	13	14	15	1	0.0	2.09	2	;LOS LC2 LH1 LOS	11451976
12	13	14	18	1	0.0	5.85	3	;LOS LC2 LH1 LC2	11447440
12	13	14	18	1	0.0	0.42	2	;LOS LC2 LH1 LC2	11447440
13	14	15	16	1	0.0	3.77	3	;LC2 LH1 LOS LC	11773440
13	14	18	19	1	0.0	5.85	3	;LC2 LH1 LC2 LOS	11445760
13	14	18	19	1	0.0	0.42	2	;LC2 LH1 LC2 LOS	11445760
14	15	16	37	1	180.0	16.74	2	;LH1 LOS LC LP2	11526022
14	18	19	20	1	0.0	3.77	3	;LH1 LC2 LOS LC	11788138
15	16	37	38	1	0.0	0.42	6	;LOS LC LP2 LP2	11428024
16	37	38	39	3	;			;LC LP2 LP2 LP2	31918476
18	19	20	22	1	180.0	16.74	2	;LC2 LOS LC LP2	11526160
19	20	22	23	1	0.0	0.42	6	;LOS LC LP2 LP2	11428024
20	22	23	24	3	;			;LC LP2 LP2 LP2	31918476
22	23	24	25	3	;			;LP2 LP2 LP2 LP2	31923444

```

23 24 25 26 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
24 25 26 27 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
25 26 27 28 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
26 27 28 29 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
27 28 29 30 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
28 29 30 31 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
29 30 31 32 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
30 31 32 33 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
31 32 33 34 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
32 33 34 35 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
33 34 35 36 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP3 31923582
37 38 39 40 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
38 39 40 41 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
39 40 41 42 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
40 41 42 43 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
41 42 43 44 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LH1 31923306
42 43 44 45 1 0.0 5.86 3 ;LP2 LP2 LH1 LH1 11909506
43 44 45 46 2 0.00000E+00 0.20000E+03 ;LP2 LH1 LH1 LP2 21895944
44 45 46 47 1 0.0 5.86 3 ;LH1 LH1 LP2 LP2 11909506
45 46 47 48 3 ; ;LH1 LP2 LP2 LP2 31923306
46 47 48 49 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
47 48 49 50 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
48 49 50 51 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
49 50 51 52 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP2 31923444
50 51 52 53 3 ; ;LP2 LP2 LP2 LP3 31923582

```

[dihedrals]

```

; i j k l funct ; dihedral angles code
4 3 5 7 2 0.35264E+02 0.33470E+03 ;LH1 LC2 LOS LC2 21460000
14 13 15 18 2 0.35264E+02 0.33470E+03 ;LH1 LC2 LOS LC2 21190000
16 15 17 37 2 0.00000E+00 0.16740E+03 ;LC LOS LO LP2 21020000
20 19 21 22 2 0.00000E+00 0.16740E+03 ;LC LOS LO LP2 21020000

```

```

; Include Position restraint file
#ifdef POSRES_POPG
#include "posre_POPG.itp"
#endif

```