

La Búsqueda Conformacional. El Campo de Fuerzas

1. El fichero de Campo de Fuerzas

Todos los parámetros que se comentaron en el Tema 1 y que son necesarios para llevar a cabo los cálculos de Mecánica Molecular se encuentran guardados en unos ficheros que se describen como los Ficheros del Campo de Fuerzas.

Estos Ficheros los podéis encontrar en la Carpeta del Programa Brandy Mol dentro del subdirectorío chm (C:\BrandyMol\chm).

El paquete de modelización molecular Tinker utiliza la extensión *prm* para designar a estos ficheros. Dentro de este subdirectorío os encontrareis con distintos Campos de Fuerza que Tinker suministra junto con uno basado en MM3 y que hemos modificado nosotros MM3BrandyMol.prm. El listado de los distintos campos de fuerza disponibles es el siguiente:

1. amber98.prm y amber99.prm

Son los parámetros de AMBER (*Assisted Model Building and Energy Refinement*) para proteínas y ácidos nucleicos. Desarrollado por el Profesor Peter Kollman.

[Página Web de AMBER](http://ambermd.org/) (<http://ambermd.org/>)

2. amoebapro.prm

Un Campo de Fuerzas específico de Tinker desarrollado por el Prof. Jay W. Ponder, el autor de Tinker.

[Página Web de TINKER](http://dasher.wustl.edu/tinker/) (<http://dasher.wustl.edu/tinker/>)

3. charmm27.prm

El Campo de Fuerzas CHARMM27 (*Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics*) ha sido desarrollado para proteínas y lípidos. La mayoría de los ácidos nucleicos y moléculas pequeñas aún no han sido incluidas en estos parámetros.

[Página Web de CHARMM](http://www.charmm.org/) (<http://www.charmm.org/>)

4. oplsa.prm

OPLS (*Optimized Potential for Liquid Simulations*) es un Campo de Fuerzas desarrollado por el grupo del Profesor William L. Jorgensen.

[Página Web de William L. Jorgensen](http://zarbi.chem.yale.edu/software.html) (<http://zarbi.chem.yale.edu/software.html>)

5. MM3BrandyMol.prm El campo de Fuerzas MM3 (*Molecular Mechanics*) es uno de los más utilizados en Química Orgánica ha sido desarrollado por el Profesor Norman L. Allinger. Este fichero es una modificación del fichero de campo de Fuerzas MM3-2000 de Tinker adaptado para la docencia.

[Página Web de Norman L. Allinger](http://www.chem.uga.edu/people/faculty/allinger)

(<http://www.chem.uga.edu/people/faculty/allinger>)

6. mm3pro.prm Campo de Fuerzas MM3 adaptado para proteínas

Cada Campo de Fuerzas utiliza una aproximación distinta a determinados términos de la Energía por eso se distinguen múltiples Campos de Fuerzas. Durante el Curso usaremos de forma habitual *MM3BrandyMol.prm* ya que es uno de los que permiten modelizar un mayor número de moléculas.

La estructura de estos ficheros es la siguiente:

1.1. General

El comienzo del fichero dispone de una cabecera similar a la que aquí se muestra. (Analizamos por conveniencia el campo de fuerzas MM3-2000):

```
#####  
##                               ##  
## Force Field Definition      ##  
##                               ##  
#####  
  
Forcefield      MM3-2000  
Bondunit        71.94  
bond-cubic      -2.55  
bond-quartic    3.793125  !! (7/12)*bond-cubic^2  
angleunit       0.02191418  
angle-cubic     -0.014  
angle-quartic   0.000056  
angle-pentic    -0.0000007  
angle-sextic    0.000000022  
strbondunit     2.51118  
angangunit      -0.02191418  
opbondunit      0.02191418  
torsionunit     0.5  
strtorunit      -5.9975
```

En esta parte del documento nos encontramos con una serie de elementos que nos describen distintas características generales del campo de fuerzas utilizado. Inicialmente

aparece el nombre de este, y después una serie de unidades que son necesarias para homogeneizar los resultados finales. Por ejemplo:

- bondunit: es el factor de escala por el que se multiplica el valor de la $E_{Enlaces}$ para convertirla a $Kcal/mol$. Este valor es dependiente del campo de fuerzas ya que cada campo ha sido parametrizado por distintos autores.
- bond-cubic y bond-quartic: coinciden con los valores k''' , k'''' descritos en el potencial de Morse con términos cúbicos y de mayor orden.
- angleunit: corresponde con el factor de escala necesario para convertir la $E_{Flexiones}$ a su valor en $kcal/mol$.
- angle-cubic, angle-quartic, angle-pentic, angle-sextic: son los términos que aportan en la expansión de la serie de Taylor de la $E_{Flexiones}$: k'''_{ang} , k''''_{ang} , k''''''_{ang} y k''''''''_{ang} .
- strbndunit: es el factor de escala por el que se multiplica el valor de la energía debida a los términos cruzados de Tensión-Flexión ($E_{TC(strbnd)}$) para convertirla a $Kcal/mol$.
- angangunit: es el factor de escala por el que se multiplica el valor de la energía debida a los términos cruzados de Flexión-Flexión ($E_{TC(bndbnd)}$) para convertirla a $Kcal/mol$.
- opbndunit: es el factor de escala por el que se multiplica el valor de la energía debida a las interacciones fuera del plano (E_{OOP}) para convertirla a $Kcal/mol$.
- torsionunit: es el factor de escala por el que se multiplica el valor de la energía debida a las interacciones de Torsión ($E_{Torsión}$) para convertirla a $Kcal/mol$.
- strtorunit: es el factor de escala por el que se multiplica el valor de la energía debida a los términos cruzados de Tensión-Torsión ($E_{TC(strtor)}$) para convertirla a $Kcal/mol$.

Posteriormente aparece el texto relacionado con distintos parámetros que se utilizan en la cuantificación de las interacciones no-enlazantes

vdwtype	MM3-HBOND
radiusrule	ARITHMETIC
radiustype	R-MIN
radiussize	RADIUS
epsilon rule	GEOMETRIC
a-expterm	184000.0
b-expterm	12.0
c-expterm	2.25
vdw-14-scale	1.0

chg-14-scale 1.0
dielectric 1.5

- vdwtype: es el indicador del tipo de interacciones de Van der Waals que se van a computar en este campo de fuerzas puede ser Lennard-Jones, Buckingham o MM3-HBOND dependiendo del tipo de interacciones que deseamos evaluar. Para el campo de fuerzas MM3 se incluye el potencial de Buckingham con un termino direccional para los puentes de hidrógeno (MM3-HBOND).
- radiusrule: es el indicador del método de cálculo del valor r_{AB}^m en la ecuación de Buckingham, este valor característico de los dos átomos para los que se evalúa la Interacción de Van der Waals se puede obtener haciendo uso de la media aritmética, la media geométrica o la media cúbica de los valores de los radios de Van der Waals para cada uno de los átomos implicados en la interacción. Así el r_{AB}^m para la interacción de los átomos A y B sería:
 - Media Arimética: $r_{AB}^m = (r_A + r_B)/2$
 - Media Geométrica: $r_{AB}^m = \sqrt{r_A \times r_B}$
 - Media Cúbica: $r_{AB}^m = (r_A^3 + r_B^3)/(r_A^2 + r_B^2)$
- epsilonrule: establece como calcular el valor de ϵ_{AB} conocidos los valores de ϵ_A y ϵ_B . Este valor se puede calcular usando la media aritmética, la geométrica, la armónica, la media cúbica o la HHG. Cada una de estas medias se expresa a continuación:
 - Aritmética: $\epsilon_{AB} = (\epsilon_A + \epsilon_B)/2$
 - Geométrica: $\epsilon_{AB} = \sqrt{(\epsilon_A \times \epsilon_B)}$
 - Media Cúbica: $\epsilon_{AB} = (\epsilon_A^3 + \epsilon_B^3)/(\epsilon_A^2 + \epsilon_B^2)$
 - Harmónica: $\epsilon_{AB} = 2/(1/\epsilon_A + 1/\epsilon_B)$
 - HHG: $\epsilon_{AB} = 4\epsilon_A\epsilon_B/(\sqrt{\epsilon_A} + \sqrt{\epsilon_B})^2$
- a-expterm, b-expterm y c-expterm: Son los valores de los términos A,B y C para el potencial de Buckingham
- dielectric: valor de la constante dieléctrica utilizada en las interacciones de Coulomb o dipolo-dipolo

A continuación aparece, tras una serie de referencias bibliográficas donde se han publicado el grupo de parámetros la definición de los tipos de átomo.

1.2. Definición de Tipos de Átomos

En esta parte del fichero se enumeran los distintos tipos de átomos que el campo de fuerzas posee. La forma en que se describen los tipos de átomo es la siguiente:

```
#####  
##                               ##  
## Atom Type Definitions ##  
##                               ##  
#####
```

	NID	SYM	COMENT	NAT	PAT	VAL
atom	1	C	"CSP3 ALKANE"	6	12.000	4
atom	2	C	"CSP2 ALKENE"	6	12.000	3
atom	3	C	"CSP2 CARBONYL"	6	12.000	3
atom	5	H	"EXCEPT ON N,O,S"	1	1.008	1
atom	6	O	"C-O-H,C-O-C,O-O"	8	15.995	2
atom	7	O	"O=C CARBONYL"	8	15.995	1
atom	21	H	"-OH ALCOHOL"	1	1.008	1
atom	23	H	"NH AMINE/IMINE"	1	1.008	1
atom	24	H	"COOH CARBOXYL"	1	1.008	1

Cada una de las columnas tiene un significado:

- NID : asigna un número de identificación (NID) al átomo. Ese número será el que se use para referirnos a él en el resto del fichero de campo de fuerzas
- SYM: símbolo del átomo tratado
- COMENT: un comentario que describe el tipo de átomo que se está definiendo
- NAT: número atómico del átomo descrito
- PAT: peso atómico del átomo descrito
- VAL: valencia del átomo descrito

En el caso del campo de fuerzas MM3 existen un total de 164 tipos de átomos distintos. Es importante destacar que no existe un único tipo de Hidrógeno, Carbono, Oxígeno y otros. El identificador del átomo depende no solo del tipo de átomo que se trata sino también del entorno cercano de este. Así, por ejemplo los Hidrógenos unidos a Carbono se designan con el NID=5 mientras que los unidos a O de alcohol poseen NID=21 y los H de los ácidos carboxílicos poseen un NID=24.

1.3. Parámetros de Van der Waals y Puentes de Hidrógeno

Después de la descripción de los tipos de átomos presentes en el campo de fuerzas se describen los parámetros de las interacciones no-enlazantes de Van der Waals. Los parámetros de Van der Waals se incluyen para cada átomo de forma que siempre es posible determinar los valores de r_{AB}^m y de ϵ_{AB} usando las reglas *radiusrule* y *epsilon-rule* establecidas en el campo de fuerzas.

Así los parámetros de Van der Waals que aparecen en el Campo de Fuerzas MM3 son:

```
#####
##                                     ##
##  Van der Waals Parameters         ##
##                                     ##
#####
```

	NID	RM	EPS
v _{dw}	1	2.040	0.027
v _{dw}	2	1.960	0.056
v _{dw}	3	1.940	0.056
v _{dw}	4	1.940	0.056
v _{dw}	5	1.620	0.020

Los valores que aparecen en las dos últimas columnas (RM) y (EPS) corresponden con los dos parámetros necesarios para la evaluación de la energía de Van der Waals usando el Potencial de Buckingham. Así para la interacción entre un C *sp*³ (NID = 1) y un C *sp*² el valor de la r_{AB}^m sería el doble del valor medio aritmético (*radiusrule* ARITHMETIC), y el valor de ϵ_{AB} el valor medio geométrico (*epsilon-rule* GEOMETRIC).

$$r_{Csp3-Csp2}^m = (r_{Csp3} + r_{Csp2}) = 4.080 \epsilon_{Csp3-Csp2} = \sqrt{\epsilon_{Csp3} \times \epsilon_{Csp2}} = 0.039$$

En algunas situaciones especiales los valores obtenidos para r_{AB}^m y ϵ_{AB} no son muy correctos si se calculan como valores medios de los indicados para cada átomo por separado y por ello se recurre a introducir un apartado donde se enumeran parámetros de Van der Waals especiales:

```
#####
##                                     ##
##  Van der Waals Pair Parameters     ##
##                                     ##
#####
```

v _{dwpr}	1	5	3.560	0.023
v _{dwpr}	1	36	3.557	0.023

Estos parámetros modifican solo dos interacciones especiales la de *Csp3* con H y con D. El resto de los valores que aparecen en este apartado están relacionados con tipos de átomos muy especiales de la molécula de Ferroceno.

La siguiente parte del documento enumera las interacciones debidas a los puentes de Hidrógeno:

```
#####
##                                     ##
##  Hydrogen Bonding Parameters  ##
##                                     ##
#####
```

	NIDY	NIDH	RM	EPS
hbond	6	21	2.110	3.000
hbond	6	23	2.380	1.300
hbond	8	21	2.150	4.700
hbond	8	23	2.400	2.280

Estos parámetros están relacionados con el potencial de Buckingham para puentes de Hidrógeno, este potencial es específico de los campos de Fuerza MM del Profesor Norman L. Allinger. La primera columna, NIDY, describe el tipo de átomo Y que forma el puente de Hidrógeno mientras que NIDH describe el tipo de Hidrógeno. Recordar que un átomo con NID=21 es un hidrógeno unido de un alcohol, mientras que un átomo con NID 23 es un hidrógeno de una amina. Así, el término:

```
hbond      6      21      2.110      3.000
```

describe el puente de hidrógeno formado por un oxígeno de un alcohol o un éter con el hidrógeno de un alcohol ($-O \cdots H - O -$), mientras que

```
hbond      6      23      2.380      1.300
```

describe el puente de hidrogeno formado por un oxígeno de un alcohol o un éter con el hidrógeno de una amina ($-O \cdots H - N -$).

La columna RM indica la distancia de equilibrio para el puente de Hidrógeno entre esos átomos (r_{HB}^m), y la columna EPS describe el valor de ϵ_{HB} para ese mismo tipo de puente de Hidrógeno. Tal y como se observa un puente de Hidrógeno en un alcohol es mas fuerte (suministra más energía al formarse y por ello posee un ϵ_{HB} mayor, mínimo más bajo) que el que se forma con una amina y un alcohol, siendo además la distancia algo más corta en los alcoholes.

1.4. Parámetros de Interacciones de Tensión

Posteriormente aparecen en el campo de Fuerzas los parámetros relacionados con las Interacciones de enlace.

```
#####  
##                                     ##  
## Bond Stretching Parameters      ##  
##                                     ##  
#####
```

	NIDA	NIDB	KAB	RAB
bond	1	1	4.4900	1.5247
bond	2	2	7.5000	1.3320
bond	4	4	15.2500	1.2100
bond	3	7	10.1000	1.2080
bond	3	77	9.8000	1.2140

Para un enlace entre dos átomos $A - B$ estos parámetros corresponden con:

- los identificadores para los dos tipos de átomos que forman el enlace (NIDA y NIDB)
- la constante de fuerzas (KAB) y
- la distancia de equilibrio en Å (RAB).

Las unidades que de forma estándar deberían usarse para las constantes de fuerzas deberían ser:

- (Unidades de energía)·(Unidades de distancia)⁻² o bien
- (Unidades de fuerza)·(Unidades de distancia)⁻¹

ya que $\text{energía} = \text{fuerza} \times \text{distancia}$.

La unidad más usual es $\text{mdyn} \cdot \text{Å}^{-1}$ aunque esta puede transformarse de forma fácil a $\text{Kcal} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{Å}^{-2}$ utilizando el factor de conversión incluido en las reglas iniciales (bondunit: $71.94 \text{ Kcal} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{Å}^{-2} / \text{mdyncdot} \cdot \text{Å}^{-1}$). En el listado anterior mostramos los mismos enlaces que aparecen en la Tabla de Enlaces del Tema de Introducción a la Mecánica Molecular.

Las distancias de enlace son algo distintas cuando el sistema es cíclico, por ello, el campo de fuerzas posee parámetros adicionales específicos para enlaces entre átomos que se encuentran dentro de un ciclo que soporte una tensión excesiva: anillos de 3, 4 y 5 miembros. Estos listados de parámetros aparecen después de los *Bond Stretching Parameters*.

Aunque la distancia de equilibrio de un enlace entre los átomos A y B depende

primordialmente de estos átomos, los átomos que se encuentran unidos a éstos pueden afectar la longitud $A - B$ si son muy electronegativos. Esta es la razón del listado de parámetros de Electronegatividad de la Longitud de Enlace:

```
#####
##                                     ##
##  Electronegativity Bond Length Parameters  ##
##                                     ##
#####

          NIDA      NIDB      NIDC      RAB(Cor)
electneg      1        1        6        -0.0070
```

Para un enlace entre dos átomos $A - B$ donde alguno de ellos se une también a un átomo C estos parámetros corresponden con:

- los identificadores para los tres tipos de átomos los que forman el enlace (NIDA y NIDB) y NIDC que está unido a A o B .
- RAB(Cor) es la corrección a la longitud del enlace $A - B$ que se definió previamente en el *Bond Stretching Parameters* si alguno de los átomos se encuentra unido a NIDC.

Por ejemplo: Si calculamos la molécula de Etanol ($CH_3 - CH_2 - OH$). Los átomos de C de esta serán átomos tipo 1 (CSP3 ALKANE Carbonos sp^3 de alcano) y la longitud de enlace teórica sería

```
bond          1          1          4.4900          1.5247
```

Sin embargo, al ser el Oxígeno del etanol un átomo tipo 6 y estar unido a uno de los átomos tipo 1 (C-O-H, C-O-C, O-O) se corrige esa longitud a $R_{1-1} = 1.5247 - 0.0070 = 1.5177$.

1.5. Parámetros de Interacciones de Flexión

Posteriormente aparecen en el campo de Fuerzas los parámetros relacionados con las Interacciones de flexión.

```
#####
##                                     ##
##  Angle Bending Parameters  ##
##                                     ##
#####
```

	NIDA	NIDB	NIDC	KABC	ANG0	ANG1	ANG2
angle	1	1	1	0.670	109.500	110.200	111.000
angle	1	1	5	0.590	109.800	109.310	110.700
angle	5	1	5	0.550	107.600	107.800	109.470
angle	5	2	5	0.450	119.000	0.000	0.000
angle	2	2	5	0.490	120.000	120.500	0.000
angle	4	4	124	0.250	180.000	0.000	0.000
angle	1	2	1	0.540	117.000	0.000	0.000
angle	1	2	2	0.470	122.300	0.000	0.000
angle	1	3	7	0.850	123.500	123.500	0.000

Para un ángulo entre los átomos $A - B - C$ estos parámetros corresponden con:

- los identificadores para los tres tipos de átomos que forman el ángulo (NIDA, NIDB y NIDC)
- la constante de fuerza utilizada en el Potencial de Flexión (KABC) y
- los ángulos de equilibrio cuando el átomo central (B) se encuentra unido, además de a los átomos A y C, a 0, 1 o 2 átomos de hidrógeno respectivamente (ANG0, ANG1 y ANG2).

En el caso de las constantes de fuerza de flexión sus unidades deberían ser:

- (Unidades de energía)·(Unidades de ángulo)⁻² o bien
- (Unidades de fuerza)·(Unidades de distancia)·(Unidades de ángulo)⁻²,

ya que *energía = fuerza x distancia*.

Por ello, la unidad más usual es $mdyn \cdot \text{Å} \cdot rad^{-2}$ aunque esta puede transformarse de forma fácil a $Kcal \cdot mol^{-1} \cdot rad^{-2}$ utilizando el factor de conversión incluido en las reglas iniciales (angleunit: $0.02191418 Kcal \cdot mol^{-1} \cdot rad^{-2} / mdyn \cdot \text{Å} \cdot rad^{-2}$).

En el listado anterior mostramos los mismos enlaces que aparecen en la Tabla de Ángulos del Tema de Introducción a la Mecánica Molecular.

Al igual que ocurría en los parámetros para el Potencial de Tensión es necesario incluir

parámetros específicos útiles para sistemas cíclicos tensionados, y estos aparecen listados en el Fichero justo despues de los *Angle Bending Parameters*.

Encontrareis adicionalmente algunos parámetros de flexión relacionados con estructuras plano-cuadradas, de bipirámide-trigonal, pirámide cuadrada o bipirámide octahédrica, pero todos ellos están desactivados y no se utilizan en los cálculos.

1.6. Parámetros de Interacciones de Tensión-Flexión

Posteriormente aparecen en el Campo de Fuerzas los parámetros relacionados con las Interacciones de Tensión-Flexión.

```
#####
##                                     ##
##  Stretch-Bend Parameters  ##
##                                     ##
#####

strbnd      NIDB      KABC0      KABC1      KABC2
strbnd      1         0.130      0.080      0.000
strbnd      6         0.100      0.090      0.000
```

Para un ángulo entre los átomos $A - B - C$ estos parámetros corresponden con:

- el identificador del átomo central (NIDB)
- las constantes de fuerza utilizadas en el Potencial de Tensión-Flexión cuando el átomo central (B) se encuentra unido, además de a los átomos A y C, a 0, 1 o 2 átomos de hidrógeno respectivamente (KABC0, KABC1 y KABC2).

En el caso de las constantes de fuerza de Tensión-Flexión sus unidades deberían ser:

- $(\text{Unidades de energía}) \cdot (\text{Unidades de distancia})^{-1} (\text{Unidades de ángulo})^{-1}$ o bien
- $(\text{Unidades de fuerza}) \cdot (\text{Unidades de ángulo})^{-1}$,

ya que $\text{energía} = \text{fuerza} \times \text{distancia}$.

Por ello, la unidad más usual es $\text{mdyn} \cdot \text{rad}^{-1}$ aunque esta puede transformarse de forma fácil a $\text{Kcal} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{Å}^{-1} \cdot \text{rad}^{-1}$ utilizando el factor de conversión incluido en las reglas iniciales ($\text{strbnd unit: } 2.51118 \text{ Kcal} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{Å}^{-1} \cdot \text{rad}^{-1} / \text{mdyn} \cdot \text{rad}^{-1}$).

1.7. Parámetros de Interacciones de Flexión-Flexión

Posteriormente aparecen en el Campo de Fuerzas los parámetros relacionados con las Interacciones de Flexión-Flexión.

```
#####  
##                               ##  
##  Angle-Angle Parameters  ##  
##                               ##  
#####
```

	NIDB	KABC0	KABC1	KABC2
angang	1	0.240	0.300	0.000

Estos parámetros poseen una estructura similar a la vista previamente para *Stretch-Bend Parameters*.

1.8. Parámetros de Interacciones Fuera del Plano

Posteriormente aparecen en el Campo de Fuerzas los parámetros relacionados con las Interacciones de Fuera del Plano.

```
#####  
##                               ##  
##  Out-of-Plane Bend Parameters  ##  
##                               ##  
#####
```

	NIDB	NIDA	KAB
opbend	2	1	0.100

Para una agrupación de átomos $(C-)(D-)B - A$ donde los átomos A C y D se unen al átomo central B estos parámetros corresponden con:

- el identificador del átomo central (NIDB) y del átomo A (NIDA) que sale fuera del plano definido por B C y D y
- KAB es la constante de fuerza utilizada en el Potencial Fuera del Plano.

Las unidades para estas constantes de fuerza son las mismas que las utilizadas para el Potencial de Flexión (*Angle Bending Parameters*).

1.9. Parámetros de Interacciones de Torsión

Posteriormente aparecen en el Campo de Fuerzas los parámetros relacionados con las Interacciones de Torsión.

```
#####
##                                     ##
##  Torsional Parameters             ##
##                                     ##
#####

      NIDA   NIDB   NIDC   NIDD   VABCD   GAM   PER
torsion   1     1     1     1     0.185   0.0   1

      VABCD   GAM   PER   VABCD   GAM   PER
torsion  0.170  180.0   2     0.520   0.0   3
```

Para un ángulo de torsión entre los átomos $A - B - C - D$ estos parámetros corresponden con:

- el identificador de los cuatro átomos que forman el ángulo de torsión (NIDA, NIDB, NIDC y NIDD)
- tres grupos de parámetros formados por dos números reales y un entero que describen:
 - VABCD La constante de Fuerza para esa Torsión (valor V_{ABCD} en la $E_{Torsión\ ABCD}$)
 - GAM El desplazamiento de fase de esa Torsión (valor γ en la $E_{Torsión\ ABCD}$) y
 - PER La periodicidad de la Torsión (valor n en la $E_{Torsión\ ABCD}$)

En los parámetros de Torsión existen generalmente tres periodicidades distintas (1, 2 y 3), aunque pueden incluirse hasta 6.

Al igual que ocurría en los parámetros para el Potencial de Flexión es necesario incluir parámetros específicos útiles para sistemas cíclicos tensionados, y estos aparecen listados en el Fichero justo después de los *Torsional Parameters*.

1.10. Parámetros de Interacciones de Tensión-Torsión

Posteriormente aparecen en el Campo de Fuerzas los parámetros relacionados con las Interacciones de Tensión-Torsión.

```
#####  
##                               ##  
##  Stretch Torsion Parameters  ##  
##                               ##  
#####
```

```
strtors      NIDB      NIDC      0.000      0.000      KBCSTRTORS  
              1         1         0.000      0.000      0.059
```

Para un ángulo de torsión entre los átomos $A - B - C - D$ estos parámetros asignan la constante de fuerza para el término cruzado de Tensión-Torsión. Únicamente se mira el enlace central y los parámetros corresponden con:

- el identificador de los dos átomos que forman el enlace central del ángulo de torsión (NIDB y NIDC)
- KBCSTRTORS La constante de Fuerza para el Término cruzado de Tensión-Torsión (valor V_{ABCD} en la $E_{Torsión\ ABCD}$)

1.11. Parámetros de Interacciones Electroestáticas

Posteriormente aparecen en el Campo de Fuerzas los parámetros relacionados con las Interacciones Electroestáticas en sistemas cargados.

```
#####  
##                               ##  
##  Atomic Partial Charge Parameters  ##  
##                               ##  
#####
```

```
NID CHARGE  
charge      16         1.000
```

Para cada tipo de átomo que posea carga (NID) se enumera el valor de ésta con un número real (CHARGE)

Posteriormente aparecen en el Campo de Fuerzas los parámetros relacionados con las Interacciones Electroestáticas en sistemas no-cargados (Interacciones Dipolo-Dipolo).

```
#####
##                                     ##
##  Bond Dipole Moment Parameters  ##
##                                     ##
#####
```

```

          NIDA  NIDB  DIP  POS
dipole    1    2  0.9000  0.500
```

Para cada enlace entre dos átomos de distinta electronegatividad los parámetros corresponden con:

- el identificador de los dos átomos que forman el enlace (NIDA y NIDB)
- DIP El valor del momento dipolar expresado en Debyes. Si el valor es positivo indica que NIDA es el átomo que posee el extremo positivo del dipolo y NIDB el átomo con el extremo negativo del dipolo. Un valor negativo cambia la dirección del dipolo.(valor V_{ABCD} en la $E_{Torsión\ ABCD}$)
- POS La posición del origen del vector que describe el dipolo 0 indica que el origen está en el átomo A y 1 que está en el átomo B. Un valor de 0.5 indica que se encuentra a la mitad del enlace entre el átomo A y B.