

Взаимосвязь точности описания диэлектрической проницаемости органических жидкостей и типа молекулы

М. А. Орехов

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва
125412, Россия

E-mail: mo2411@mail.ru

Статья поступила в редакцию 2 ноября 2024 г.

Аннотация. Проведено молекулярно-динамическое моделирование диэлектрической проницаемости для 50 органических жидкостей. Моделирование выполнено в рамках модели потенциала межатомного взаимодействия OPLS/CM1A. Определены основные факторы, влияющие на отклонение результатов моделирования от экспериментальных данных. Наибольшее отклонение наблюдается для молекул, содержащих в своем составе R1-O-R2 атомы кислорода и атомы хлора. Показано, что корреляция этих факторов с погрешностью существенно выше, чем корреляция с числом активных торсионных углов в молекуле. Таким образом, выявлена необходимость использования репараметризаций модели OPLS/CM1A для описания диэлектрических свойств эфиров и соединений, содержащих хлор. <https://doi.org/10.33849/2024302>

1. ВВЕДЕНИЕ

Диэлектрическая проницаемость является одним из важнейших свойств органических жидкостей [1]. Она играет ключевую роль в процессах растворения, оказывает влияние на кинетику химических реакций [2–4], влияет на взаимодействие раствора с поверхностью [5].

Особенно важным является значение диэлектрической проницаемости в задачах электрохимии. В электрохимических системах определяющее значение имеет степень диссоциации и растворимость солей в растворе [6, 7]. Эти характеристики зависят от энергии сольватации и от степени экранирования кулоновского взаимодействия ионов электролита. Данные характеристики во многом определяются диэлектрической проницаемостью жидкости. В частности, классическая модель сольватации Борна [8, 9] показывает зависимость вида $(1 - 1/\epsilon)$ для энергии сольватации ионов в жидкости. Современные кластер-континуальные модели сольватации позволяют с хорошей точностью рассчитывать энергию сольватации простых ионов в комбинации с методом теории функционала электронной плотности (DFT) [10, 11]. В данных моделях ион-молекулярный кластер описывается с применением метода DFT, а окружающая жидкость описывается как континуальный диэлектрик с заданной диэлектрической проницаемостью.

Для задач электрохимии также важно описание реакций переноса электрона [3, 12, 13]. В данных реакциях диэлектрическая проницаемость влияет на отклик жидкости на большом расстоянии от ионов. Значения диэлектрической проницаемости можно использовать в рамках кластер-континуальных моделей для точного вычисления энергий окислительно-восстановительных реакций [2, 3]. Это имеет особенно важное значение для жидкостей с промежуточными значениями диэлектрической проницаемости и для двухвалентных ионов [2, 12, 14].

Метод молекулярной динамики активно применяется для вычисления диэлектрической проницаемости жидкостей [15–17]. Проводится, в том числе, моделирование диэлектрической проницаемости в приложенном электрическом поле [18]. Для вычисления диэлектри-

ческой проницаемости применяются также методы машинного обучения [19]. Также с применением машинного обучения проводится вычисление дипольных моментов молекул в жидкости [20].

При вычислении диэлектрической проницаемости в рамках метода молекулярной динамики определяющее значение играет выбор потенциала межатомного взаимодействия. Одним из самых популярных потенциалов для описания свойств жидкостей является потенциал OPLS-AA (Optimized Potentials for Liquid Simulations – All Atom) [21]. В рамках этой модели параметры потенциала атомов определяются не только химическим элементом атома, но и его окружением в молекуле. Это создает сложности с автоматическим заданием параметров моделирования для большого числа молекул. Для решения этой проблемы существуют автоматические системы генерации параметров и файлов для моделирования, такие как LigParGen [22], который использует для задания зарядов модель CM1A [22].

В данной работе показано, что применение модели OPLS/CM1A для моделирования диэлектрической проницаемости эфиров и хлоридов неэффективно. Это накладывает существенные требования на методику моделирования.

В разделе 2 описано молекулярно-динамическое моделирование, использованное в данной работе. В разделе 3 описаны результаты расчетов и оценки точности моделирования для разных классов молекул. В разделе 4 приводятся выводы.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Для моделирования использовался метод классической молекулярной динамики. Расчеты выполнены с использованием программного пакета LAMMPS [23].

Для описания межатомного взаимодействия использовались потенциалы OPLS-AA [21] с зарядами, определенными методом CM1A [22]. Итоговая модель обозначается OPLS/CM1A. Функциональная форма потенциала состоит из межмолекулярных (nonbonded: U_{nb}) и внутримолекулярных (bonded: U_b) взаимодействий

$$U_{OPLS} = U_{nb} + U_b. \quad (1)$$

Межмолекулярные взаимодействия включают кулоновское взаимодействие и потенциал Леннарда-Джонса

$$U_{nb} = \sum_i \sum_j q_i q_j / r_{ij} + 4\epsilon_{ij} (\sigma_{ij}^{12} / r_{ij}^{12} - \sigma_{ij}^6 / r_{ij}^6), \quad (2)$$

где i, j — номера атомов взаимодействующих молекул, q_i, q_j — частичные заряды на этих атомах (определяются методом CM1A [22]), r_{ij} — расстояние между атомами, $\epsilon_{ij}, \sigma_{ij}$ — параметры Леннарда-Джонсовского потенциала для соответствующих атомов. Внутримолекулярное взаимодействие имеет функциональную форму:

$$U_b = \sum_{bonds} K_r (r - r_{eq})^2 + \sum_{angles} K_\theta (\theta - \theta_{eq})^2 + \sum_{dihedral} \frac{V_1^i}{2} [1 + \cos(\phi_i)] + \frac{V_2^i}{2} [1 - \cos(2\phi_i)] + \frac{V_3^i}{2} [1 - \cos(3\phi_i)], \quad (3)$$

где r, r_{eq} — длина и равновесная длина химических связей, K_r, K_{theta} — силовые константы, соответствующие химическим связям и углам, θ, θ_{eq} — текущие и равновесные величины углов между химическими связями, $V_{1,2,3}^i$ — коэффициенты ряда Фурье для торсионных углов, ϕ — величины торсионных углов молекулы.

Для задания параметров взаимодействия использовалась система автоматической параметризации и генерации файлов LigParGen [22]. Это позволило провести расчеты для 50 различных веществ. Температура системы 298 К. Давление 1 бар. Шаг численного интегрирования 1 фс. Для учета дальнедействующего кулоновского взаимодействия использовался метод Particle-Particle-Mesh (PPPM) [24]. Молекулы добавлялись в расчетную ячейку в узлах кубической решетки. Проводился вывод системы на равновесие в расчете с применением термостата и баростата. Рассматривалась система, содержащая 125 молекул соответствующего вещества. После вывода системы на равновесие проводилось вычисление 9 траекторий по 600 пс каждая. Проводилось усреднение по времени и данным траекториям.

Для вычисления диэлектрической проницаемости использовалась формула [25]

$$\epsilon = 1 + \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{3\epsilon_0 V k T}, \quad (4)$$

где M — полный дипольный момент, ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, V — полный объем системы, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, $\langle \rangle$ — усреднение. Данная формула позволяет получить диэлектрическую проницаемость из равновесной молекулярно-динамической траектории в микроканоническом ансамбле. В данной формуле предполагается, что высокочастотная диэлектрическая проницаемость $\epsilon_\infty = 1$. Это предположение выполняется в рамках модели OPLS, в которой отсутствует поляризация атомов в молекуле.

Определение взаимосвязи параметров молекул и погрешности проводилось путем сравнения результатов моделирования и экспериментальных данных [26]. Было

Таблица 1. Среднеквадратичные отклонения $\langle \Delta\epsilon^2 \rangle$ от экспериментальных данных и коэффициент детерминации R^2 для моделей с использованием разных потенциалов.

Потенциал	$\langle \Delta\epsilon^2 \rangle$	R^2
OPLS/CM1A (эта работа)	6.6	0.8
GAFF [27]	18.46	0.68
GROMOS [28]	8.8	0.74

проведено вычисление корреляций погрешности и соответствующих характеристик молекулы. Для определения типов атомов в молекуле использовалась внутренняя типизация атомов потенциала OPLS/CM1A. В ее рамках атомы в молекуле имеют разные типы, в зависимости от их химического элемента и соседних атомов в молекуле.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

3.1. Корректность и общая погрешность расчета

Сравнение результатов моделирования и экспериментальных данных показано на рисунке 1. Для большинства молекул наблюдается хорошее согласие результатов моделирования и экспериментальных данных. В таблице 1 показаны среднеквадратичные отклонения результатов моделирования от экспериментальных данных и коэффициенты детерминации R^2 по данным этой работы (для модели OPLS/CM1A) и для потенциалов GAFF (Generalized Amber Force Field) и GROMOS (GRONingen MOlecular Simulation). Видно, что OPLS/CM1A незначительно опережает по точности эти потенциалы.

Для подтверждения корректности расчетов проведено моделирование воды с использованием модели SPC/E. Методика и условия моделирования полностью совпадают с условиями и методикой, использованными для органических молекул и потенциала OPLS/CM1A. Полученное значение диэлектрической проницаемости воды $\epsilon = 71.2$. Оно хорошо совпадает с диэлектрической проницаемостью SPC/E воды, полученной в работах [29] $\epsilon = 70.7 \pm 0.8$ и $\epsilon = 72.4$ [25]. При этом, диэлектрическая проницаемость воды в модели SPC/E отличается от экспериментального значения диэлектрической проницаемости воды при 298 К $\epsilon_{exp} = 78$ [29]. В данном случае, для подтверждения корректности методики расчетов, важно именно согласие с расчетными значениями из литературы, а не с экспериментальным значением для воды.

Кроме того, корректность расчетов подтверждается согласием результатов расчетов с альтернативными параметризациями OPLS для хлоридов. Подробное обсуждение этих результатов рассмотрено в подразделе 3.3.

Также проведено исследование зависимости результатов моделирования от размера системы. Проведено моделирование для ячейки, содержащей 1000 молекул ацетонитрила. В ячейке, содержащей 1000 молекул, значение диэлектрической проницаемости составило $\epsilon = 31.7$ при значении диэлектрической проницаемости в системе с 125 молекулами $\epsilon = 32.03$. Таким образом, зависимость от размера системы является

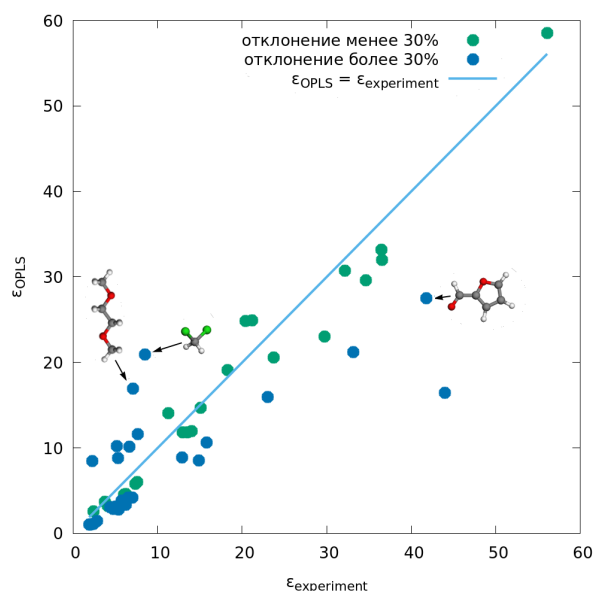


Рисунок 1. Экспериментальные [26] и расчетные значения диэлектрической проницаемости жидкостей в модели OPLS/CM1A. Точки соответствуют различным молекулам. Диагональная линия соответствует идеальному согласию теории и эксперимента. Цветом показаны точки с малым и большим отклонением между расчетными и экспериментальными значениями ϵ . Показана визуализация молекул, соответствующих точкам с сильным отклонением теории и эксперимента.

достаточно слабой. Кроме того, аналогичный результат получен в работе [25]. По данным работы [25] диэлектрическая проницаемость в системе, содержащей 216 молекул, SPC/E воды составляет $\epsilon = 70.6$; в системе из 16000 молекул $\epsilon = 72.4$. Аналогично слабая зависимость наблюдается для хлоридов, как показано в разделе 3.3. Это подтверждает корректность проводимого моделирования с малым числом молекул в ячейке.

3.2. Корреляция параметров молекул и отклонений модели

Для оценки основных факторов, влияющих на погрешность модели OPLS/CM1A, проведены вычисления корреляций относительного отклонения результатов расчета от эксперимента и количества атомов разных типов в молекуле.

Данные корреляции показывают для каких именно атомов, содержащихся внутри рассматриваемого класса молекул, погрешность при описании диэлектрической проницаемости по отношению к эксперименту является наибольшей. Отметим, что в данном случае учитывается не только само присутствие конкретного типа атома в молекуле, но и количество атомов этого типа. Таким образом, предполагается, что значимость данного признака для погрешности увеличивается с увеличением количества таких атомов в молекуле.

Выделение различных типов атомов проводилось на основе модели OPLS/CM1A. В данной модели тип атома зависит не только от химического элемента, но и от локальных соседей данного атома в молекуле. Например, кислород в функциональной группе вида $C=O$ и кислород в функциональной группе вида $R-O-R'$

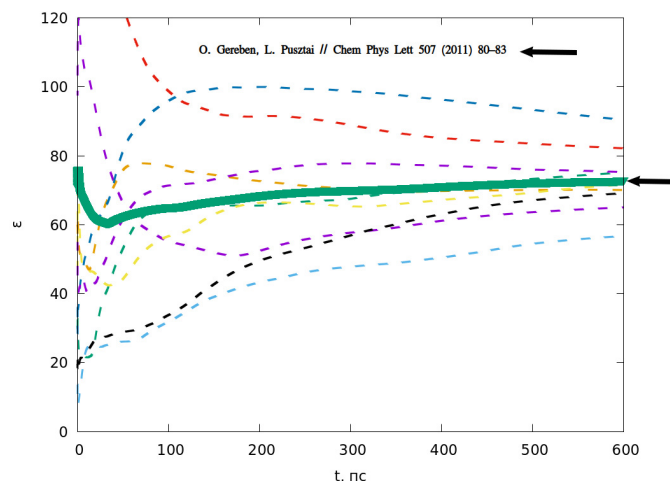


Рисунок 2. Результаты расчетов диэлектрической проницаемости для SPC/E воды от времени. Пунктирные линии — усредненные по 9 отдельным траекториям значения диэлектрической проницаемости в зависимости от времени на траектории. Сплошная зеленая линия — усредненное по этим 9 траекториям значение ϵ от времени на траектории. Стрелкой показано расчетное значение диэлектрической проницаемости воды в модели SPC/E из работы [25].

(где R — произвольная группа атомов в молекуле) соответствуют двум разным типам атома.

Расчеты коэффициента корреляции проведены по формуле

$$corr_i = \frac{\langle (\Delta\epsilon - \langle \Delta\epsilon \rangle) \times (N_{typei} - \langle N_{typei} \rangle) \rangle}{\langle (\Delta\epsilon - \langle \Delta\epsilon \rangle)^2 \rangle \langle (N_{typei} - \langle N_{typei} \rangle)^2 \rangle}, \quad (5)$$

где $\Delta\epsilon = |\epsilon_{OPLS} - \epsilon_{exp}|/\epsilon_{exp}$, ϵ_{OPLS} — диэлектрическая проницаемость по данным расчетов, ϵ_{exp} — экспериментальное значение диэлектрической проницаемости, N_{typei} — число атомов типа i в рассматриваемых молекулах.

Результаты расчетов коэффициента корреляции приведены на рисунке 3. Видно, что большинство типов атомов соответствуют малой или даже отрицательной корреляции. Исключение составляют типы атомов кислорода ($R-O-R'$ кислород, где R — произвольная группа атомов в молекуле), атомы хлора, атомы брома и атомы водорода $HC=R$. Наибольший эффект корреляции достигается для молекул, содержащих атомы хлора и кислорода ($R-O-R'$ кислород).

Наблюдаемые корреляции хорошо согласуются с тем, для каких молекул на рисунке 1 имеются сильные отклонения от линии идеального согласия теории и эксперимента. В частности, сильное отклонение наблюдается для молекулы диметоксиэтана (верхняя часть рисунка 1), содержащей два атома кислорода вида $R-O-R'$. Сильное отклонение наблюдается для молекулы дихлорметана, содержащей два атома хлора (верхняя часть рисунка 1).

Важным фактором может являться большое число активных торсионных углов в молекулах с функциональной группой $R-O-R'$. Это может приводить к сложностям усреднения большого числа конфигураций молекулы. Чтобы исключить этот фактор, была получена корреляция погрешности с количеством

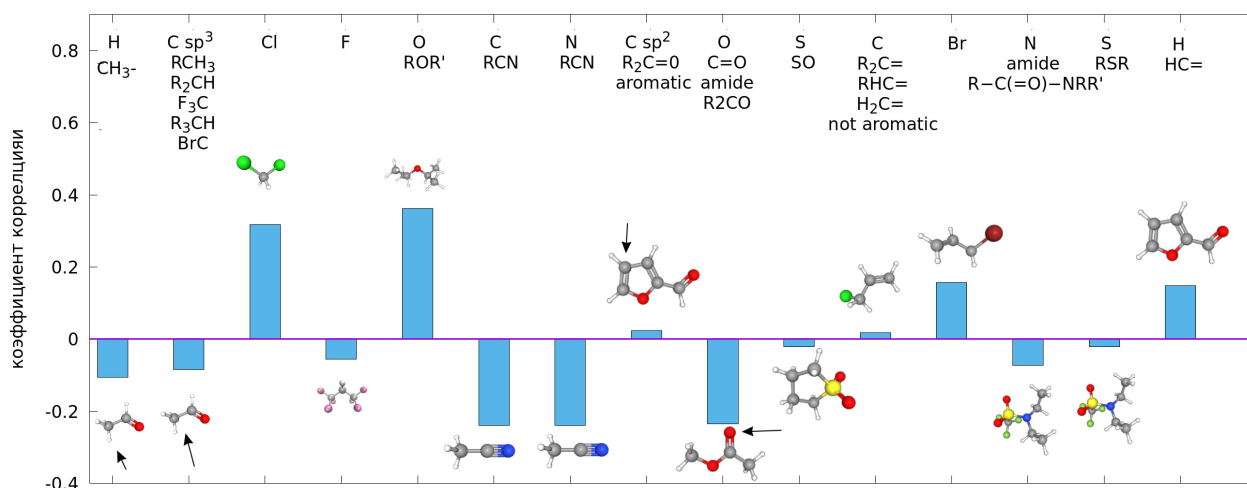


Рисунок 3. Корреляция относительной погрешности диэлектрической проницаемости (5) и количества атомов определенного типа. Тип атомов определяется химическим элементом и окружением атома. Они показаны в верхней части рисунка. Также показаны примеры молекул с атомами заданного типа.

активных торсионных углов в молекуле. Вычисление было проведено с использованием библиотеки RDKit [30]. Полученная корреляция составляет -0.05 . Таким образом, эта корреляция существенно меньше, чем корреляция количества атомов $R-O-R'$ и атомов хлора в молекуле.

3.3. Альтернативные параметризации потенциала для эфиров и хлоридов

Полученные в рамках анализа погрешности потенциала OPLS/CM1A результаты показывают, что для диэлектрической проницаемости хлоридов и эфиров (молекул, содержащих $R-O-R'$ кислород) целесообразно использовать альтернативные параметризации потенциала межатомного взаимодействия. Важно отметить, что проблема параметризации может быть в любых параметрах потенциала (2), (3), включая внутримолекулярные параметры, параметры потенциала Леннарда-Джонса или заряды атомов. В данном случае заряды соответствуют методу CM1A.

Для хлоридов в литературе описана модель, оптимизированная для описания диэлектрической проницаемости [16]. В данной работе в стандартной параметризации OPLS/CM1A дает ошибку примерно в два раза для диэлектрической проницаемости хлоридов. Репараметризация позволяет понизить эту ошибку до 4%. По данным модели [16] диэлектрическая проницаемость дихлорметана 8.85. При использовании стандартных зарядов в рамках модели OPLS диэлектрическая проницаемость дихлорметана составляет 4.4 [16]. При этом экспериментальное значение диэлектрической проницаемости дихлорметана 8.5. Мы провели расчеты со стандартными параметрами внутримолекулярного и межмолекулярного взаимодействия, но с зарядами из работы [16]. Диэлектрическая проницаемость по данным таких расчетов составляет 7.5, что находится в достаточно хорошем согласии с работой [16] и экспериментальными данными.

4. ВЫВОДЫ

Проведено молекулярно-динамическое моделирование диэлектрической проницаемости органических жидкостей в рамках модели OPLS/CM1A. Показано, что наибольшее расхождение результатов моделирования и экспериментальных данных наблюдается для молекул, содержащих в своем составе $R-O-R'$ атомы кислорода и атомы хлора. При этом корреляция с другими факторами погрешности, такими как число торсионных углов в молекуле, является существенно более слабой.

Корректность протокола моделирования подтверждена хорошим согласием данных по диэлектрической проницаемости воды с данными расчетов в других работах. Полученный в данной работе $\epsilon = 71.2$ совпадает с расчетными данными в работе [25] $\epsilon = 72.4$. Показано, что для достижения такой точности требуется усреднение по нескольким траекториям общей длиной в несколько наносекунд (рисунок 2). Кроме того, получено хорошее согласие с данными работы [16] по диэлектрической проницаемости дихлорметана.

Проведены расчеты коэффициента корреляции относительной погрешности в определении диэлектрической проницаемости и химического состава молекулы. Показано, что имеется сильная корреляция погрешности и числа атомов кислорода типа $R-O-R'$ и атомов хлора в молекуле (рисунок 3).

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа была поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации (Государственное задание № 075-00270-24-00). Расчеты были проведены с использованием ресурсов Суперкомпьютерного центра ОИВТ РАН и суперкомпьютера МВС-10П МСЦ РАН.

ПРИЛОЖЕНИЕ

В таблице A1 приведены параметры (SMILES коды [31]) всех 50 молекул, рассмотренных в данной работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Atkins P and Paula J 2006 *Physical chemistry* (Oxford University Press)
2. Bakulin I K and Orekhov M A 2023 *Physical Chemistry Chemical Physics* **25** 20686–20692
3. Kislenko V A, Pavlov S V, Nikitina V A and Kislenko S A 2024 *Physical Chemistry Chemical Physics* **26** 293–303
4. Kislenko V A, Kislenko S A and Nikitina V A 2024 *Journal of Electroanalytical Chemistry* **975** 118718
5. Reichardt C and Welton T 2010 *Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry* (Morlenbach: Wiley-VCH)
6. Xu J *et al* 2023 *Nature* **614** 694–700
7. Meng Y S, Srinivasan V and Xu K 2022 *Science* **378** eabq3750
8. Born M 1920 *Z. Physik* **1** 221–249
9. Khrapak A G, Schmidt W F and Illenberger E 2002 *Proceedings of 2002 IEEE 14th International Conference on Dielectric Liquids. ICDL 2002 (Cat. No.02CH37319)* 71–77
10. Itkis D, Cavallo L, Yashina L V and Minenkov Y 2021 *Physical Chemistry Chemical Physics* **23** 16077–16088
11. Rufino V C and Pliego J R 2021 *Physical Chemistry Chemical Physics* **23** 26902–26910
12. Delp S A, Borodin O, Olguin M, Eisner C G, Allen J L and Jow T R 2016 *Electrochimica Acta* **209** 498–510
13. Hou S, Ji X, Gaskell K, Wang P F, Wang L, Xu J, Sun R, Borodin O and Wang C 2021 *Science* **374** 172–178
14. Wang F, Hua H, Wu D, Li J, Xu Y, Nie X, Zhuang Y, Zeng J and Zhao J 2023 *ACS Energy Letters* 780–789
15. Yamaguchi T, Yamada H, Fujiwara T and Hori K 2020 *Journal of Molecular Liquids* **312** 113288
16. Liu Z, Timmermann J, Reuter K and Scheurer C 2018 *Journal of Physical Chemistry B* **122** 770–779
17. Caleman C, Van Maaren P J, Hong M, Hub J S, Costa L T and Van Der Spoel D 2012 *Journal of Chemical Theory and Computation* **8** 61–74
18. Daniels I N, Wang Z and Laird B B 2017 *Journal of Physical Chemistry C* **121** 1025–1031
19. Deng J and Jia G 2022 *Fluid Phase Equilibria* **561** 113545–113555
20. Amano T, Yamazaki T and Tsuneyuki S 2024 *Physical Review B* **110** 165159
21. Jorgensen W L, Maxwell D S and Tirado-Rives J 1996 *Journal of the American Chemical Society* **118** 11225–11236
22. Dodda L S, De Vaca I C, Tirado-Rives J and Jorgensen W L 2017 *Nucleic Acids Research* **45** W331–W336
23. Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1–19
24. Hockney R W and Eastwood J W 1988 *Computer simulation using particles* (Bristol: A. Hilger)
25. Gereben O and Pusztai L 2011 *Chemical Physics Letters* **507** 80–83
26. Christian Wohlfarth 2015 *Static Dielectric Constants of Pure Liquids and Binary Liquid Mixtures: Supplement to Volume IV/17* (Berlin: Springer)
27. Zhang Y, Zhang Y, McCready M J and Maginn E J 2018 *Journal of Chemical and Engineering Data* **63** 3488–3502
28. Riniker S, Kunz A P E and Van Gunsteren W F 2011 *Journal of Chemical Theory and Computation* **7** 1469–1475
29. Rami Reddy M and Berkowitz M 1989 *Chemical Physics Letters* **155** 173–176
30. Landrum G and Others 2006 RDKit: Open-source cheminformatics
31. Weininger D 1988 *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **28** 31–36

Таблица А1. Список всех 50 молекул рассмотренных в работе и значений расчетных и экспериментальных [26] данных для них.

SMILES код молекулы	ε_{exp}	ε_{OPLS}
<chem>C(Cl)Cl</chem>	8.50	20.90
<chem>CC#N</chem>	36.55	32.03
<chem>CC=O</chem>	21.16	24.91
<chem>C(C(F)(F)F)(C(F)(F)F)F</chem>	4.0971	3.23
<chem>C(C(F)F)(C(F)(F)F)F</chem>	5.3249	8.80
<chem>C=CCBr</chem>	6.68	10.18
<chem>C=CCCl</chem>	7.67	11.61
<chem>CN(C)S(=O)(=O)C(F)(F)F</chem>	22.98	15.94
<chem>C1COCO1</chem>	7.34	5.82
<chem>CC(=O)OC</chem>	6.2042	4.59
<chem>C(CC#N)C#N</chem>	56.09	58.50
<chem>CC(CC(F)(F)F)(F)F</chem>	11.2337	14.07
<chem>COC(=O)C=C</chem>	7.021	4.19
<chem>CCCC#N</chem>	23.70	20.55
<chem>CCC(=O)C</chem>	18.26	19.13
<chem>C1CCOC1</chem>	7.6	5.98
<chem>C1COCCO1</chem>	2.23	8.47
<chem>CCOC(=O)C</chem>	5.99	4.54
<chem>C1CCS(=O)(=O)C1</chem>	44.0	16.46
<chem>COCOC</chem>	7.069	16.94
<chem>C1=COC(=C1)C=O</chem>	41.799	27.54
<chem>C(CC#N)CC#N</chem>	34.60	29.58
<chem>C1CCC(=O)C1</chem>	13.49	11.86
<chem>CCOC(=O)C=C</chem>	6.209	3.35
<chem>CC(=C)C(=O)OC</chem>	6.53	4.18
<chem>CC1CCC(=O)O1</chem>	36.47	33.16
<chem>CCN(CC)S(=O)(=O)C(F)(F)F</chem>	20.42	24.88
<chem>CCCC(=O)C</chem>	15.1	14.68
<chem>CCC(=O)OCC</chem>	5.717	3.86
<chem>CCOC(=O)OCC</chem>	2.834	1.45
<chem>C1=CC=C(C=C1)Br</chem>	5.124	10.23
<chem>C(CCC#N)CC#N</chem>	32.12	30.76
<chem>C1CCC(=O)CC1</chem>	15.77	10.62
<chem>CCOC(=O)C(=C)C</chem>	5.81	3.58
<chem>CC(=O)CCC(=O)OC</chem>	14.843	8.55
<chem>C1CCCCC1</chem>	2.021	1.02
<chem>CCCCC(=O)C</chem>	14.00	11.94
<chem>CCCCOC(=O)C</chem>	5.03	3.13
<chem>CCCC(=O)OCC</chem>	5.29	3.12
<chem>CCCCC</chem>	1.882	1.02
<chem>CC(C)OC(C)C</chem>	3.71	3.70
<chem>CCCS(=O)CCC</chem>	33.110	21.18
<chem>CCN(CC)CC</chem>	2.3820	2.60
<chem>COC(=O)C1=CC=NC=C1</chem>	19.25	2.79
<chem>CC1=CC=CC=C1</chem>	2.39092	1.14
<chem>COC1=CC=CC=C1</chem>	4.3724	3.05
<chem>C(CCC#N)CCC#N</chem>	29.71	23.06
<chem>C1CCCC(=O)CC1</chem>	12.92	11.82
<chem>CCOC(=O)CCC(=O)C</chem>	12.852	8.88
<chem>CC(C)CCOC(=O)C</chem>	5.346	2.79
<chem>CCCCCOC(=O)C</chem>	4.73	2.87