

ERANSKINA

29 molekulen simulazioak egin dira lan honetan, haien solbatazio energia askeak kalkulatzeko. Lehenik eta behin horietako 9 simulatu dira, **ERRAZAK I** taldekoak, simulazioen nondik norakoak aztertu eta emaitza egokienak ekoizten dituzten ezarpenak zeintzuk diren ikusteko. Ondoren, beste 20 molekula simulatu dira, **ERRAZAK II** eta **ZAILAK** taldeetakoak.

Erraztasun edo zailtasunak simulazioaren konbergentzia egoki bat lortzeko konplexutasun mailari egiten dio erreferentzia. Bereizketa hori molekula bakoitzaren lotura birakor kopurua zenbatuz egin da, tortsio-mugimenduak agertarazten baitituzte. Hiru lotura birakor edo gehiago dituztenak zailtzat hartu dira. [A.3.](#) irudian agertzen direnak dira.

A.1 ERABILITAKO MOLEKULEN TAULA

Erabilitako molekula guztiak [A.1.](#) taulan zerrendatu dira. Lanean zehar erabilitako abstrakzio maila dela eta ez da beharrezkoa izan molekula bakoitzaren berezko ezaugarriak aztertzea. Simulazioetan erabili da molekula bakoitza eraikitzeke informazioa, baina emaitzak aztertzerakoan funtsezkoa izan dena haien solbatazio energiaren balio esperimentalak izan da.

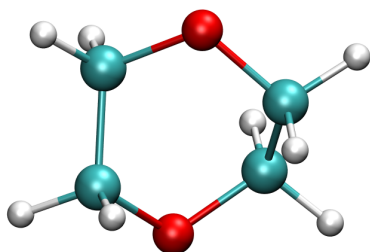
A.1. taula: Simulatutako molekulen zerrenda. Hasierako simulazioetan *Errazak I'* erabili dira. Bukaerakoetan, guztiak. *Errazak* eta *zailak* bereizteko, lotura birakorren kopurua kontuan hartu da (3 edo gehiago dituztenak zailtzat hartu dira).

ERRAZAK I		ERRAZAK II		ZAILAK	
1	1,4-dioxanoa	10	Neopentanoa	22	Flurbiprofenoa
2	1-amino-4-hidroxi-9,10-Antrazenodiona	11	Dibentzo-p-dioxina	23	Ibuprofenoa
		12	Ziklohexanoa	24	Ketoprofenoa
3	2-bromo-2-metilpropanoa	13	Etoxibentzenoa	25	2-N-etil-6-(metil-sulfonil)-4-N-
		14	Propan-1-ola		(propan-2-il)-1,3,5-
4	[(2S)-butan-2-il]-nitratoa	15	1,4-dimetilpiperazina		triazin-2,4-diamina
5	3-metilbutan-2-ona	16	Metil-ziklopropano-	26	Dimetil-sulfatoa
6	3-fenilpropan-1-ola		karboxilatoa	27	Kloropirifosa
7	But-1-enoa	17	Etilenoa	28	Azido butirikoa
8	Ziklopentanola	18	Metanamina	29	(2Z)-3,7-dimetilokta-
9	Heptan-4-ona	19	3-kloroprop-1-enoa		2,6-dien-1-ola
		20	Bromoformoa		
		21	Endrina		

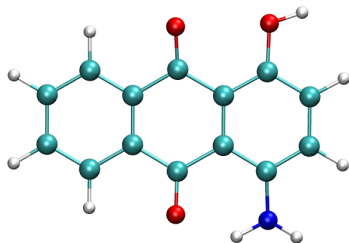
A.2 ERABILITAKO MOLEKULEN IRUDIAK

Ondoko orrietan [A.1.](#) taulako molekulak irudikatu dira. Esandako moduan, lan honen helburuak lortzeko ez da beharrezkoa izan bakoitzaren ezaugarriak kontuan hartzea, baina

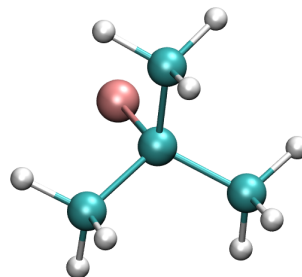
irudi hauek baliogarriak izan daitezke horiei buruzko intuizio minimo bat lortzeko. [A.1.](#) irudian [A.1.](#) taulako lehenengo zutabeko molekulak irudikatu dira, [A.2.](#) irudian bigarren zutabekoak eta [A.3.](#) irudiak hirugarrenekoak.



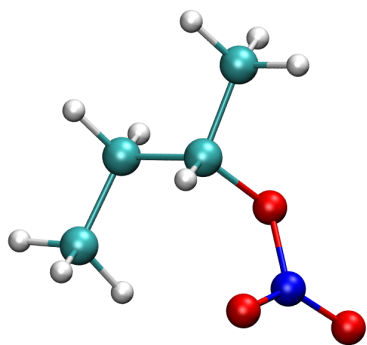
(a) 1,4-dioxanoa.



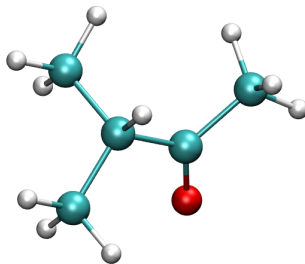
(b) 1-amino-4-hidroxi-9,10-antrazenodiona.



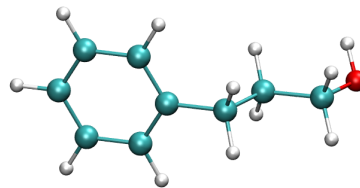
(c) 2-bromo-2-metil-propanoa.



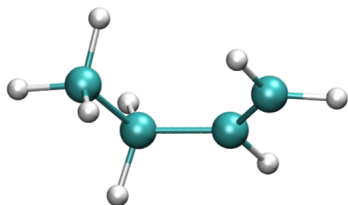
(d) [(2S)-butan-2-il]-nitratoa.



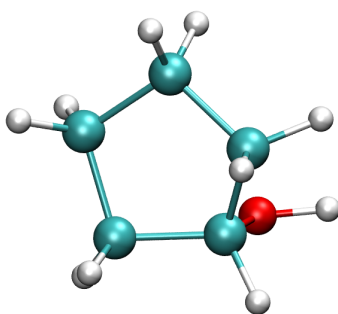
(e) 3-metilbutan-2-ona.



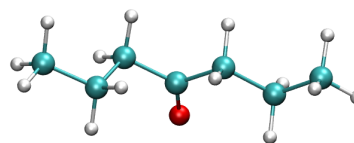
(f) 3-fenilpropan-1-ola.



(g) But-1-enoa.

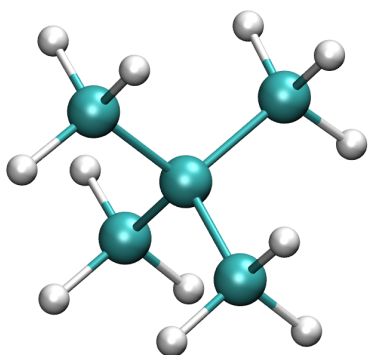


(h) Ziklopentanola.

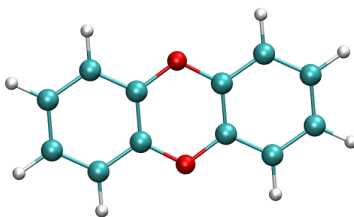


(i) Heptan-4-ona.

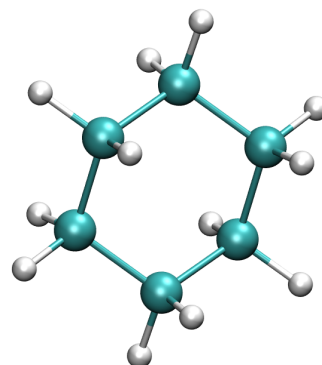
A.1. irudia: Molekula *errazak I*. Simulazioetako .pdb fitxategiak eta VMD erabiliz sortutako irudiak.



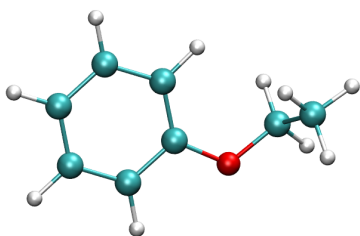
(a) Neopentanoa.



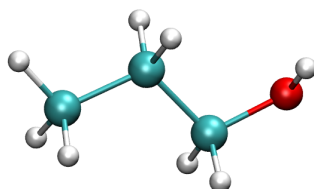
(b) Dibentzo-p-dioxina.



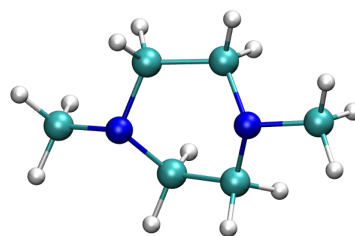
(c) Ziklohexanoa.



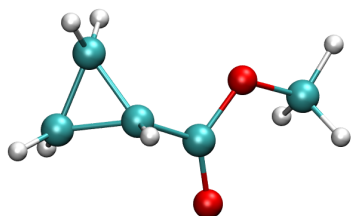
(d) Etoxibentzenoa.



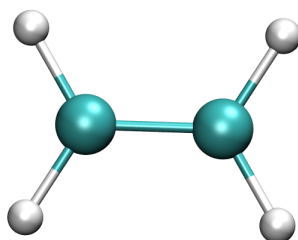
(e) Propan-1-ola.



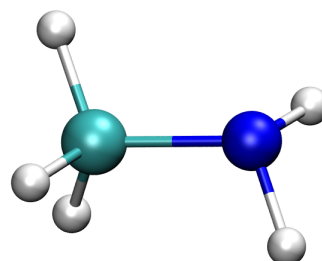
(f) 1,4-dimetilpiperazina.



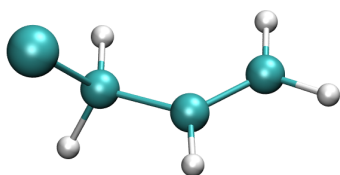
(g) Metil-ziklopropano-karboxilatoa.



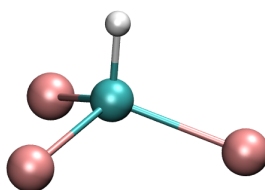
(h) Etilenoa.



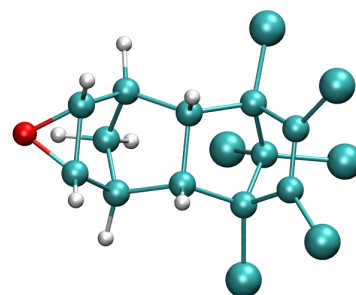
(i) Metanamina.



(j) 3-kloroprop-1-enoa.

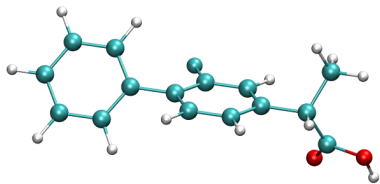


(k) Bromoformoa.

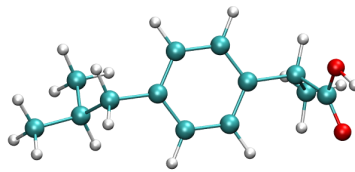


(l) Endrina.

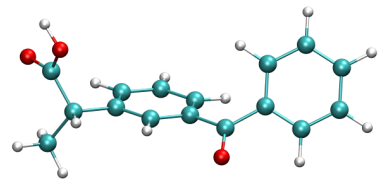
A.2. irudia: Molekula *errazak II*. Simulazioetako .pdb fitxategiak eta VMD erabiliz sortutako irudiak.



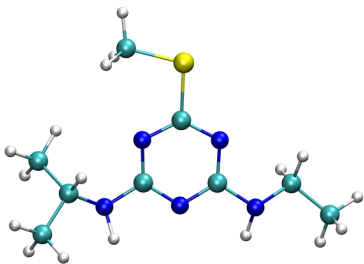
(a) Flurbiprofenoa.



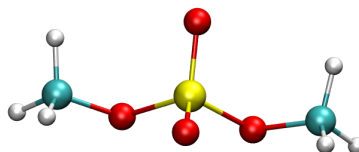
(b) Ibuprofenoa.



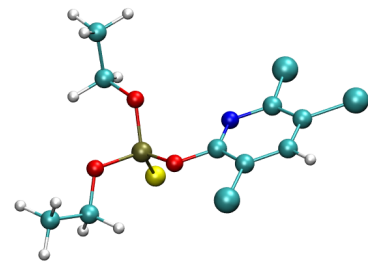
(c) Ketoprofenoa.



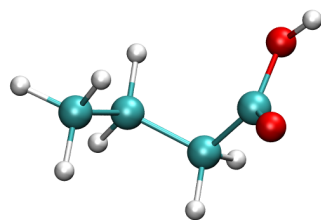
(d) 2-N-etil-6-(metil-sulfonil)-4-N-(propan-2-il)-1,3,5-triazin-2,4-diamina.



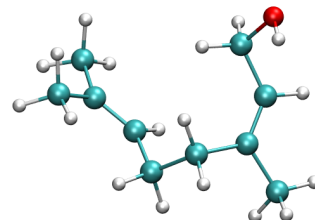
(e) Dimetil-sulfatoa.



(f) Kloropirifosa.



(g) Azido butirikoa.



(h) (2Z)-3,7-dimetilokta-2,6-dien-1-ola.

A.3. irudia: Molekula *zailak*. Simulazioetako .pdb fitxategiak eta VMD erabiliz sortutako irudiak.