Supporting information for the manuscript
"Interaction of water with the model ionic liquid [bmim][BF_4]: molecular dynamics simulations and comparison with NMR data" by Moreno et al.

TINKER Force Field Parameters for FF2

Force Field Atom Definitions

Type	Class	Symbol	Description	Atomic Number	Atomic Weight	Valence
186	50	OW	O Water (TIP3P)	8	15.999	2
187	51	HW	H Water (TIP3P)	1	1.008	1
401	401	CT	CT di Lopes	6	12.000	4
402	401	CT	CS di Lopes	6	12.000	4
403	401	CT	C1 di Lopes	6	12.000	4
404	403	CA	CR di Lopes	6	12.000	3
405	404	CA	CW di Lopes	6	12.000	3
406	402	HC	HR Alkane	1	1.008	1
407	402	HC	H1 di Lopes	1	1.008	1
408	406	HC	HA di Lopes	1	1.008	1
409	402	HC	HX legato a CX	1	1.008	1
410	411	N1	NSP2-NA di Lopes	7	14.003	3
414	401	CT	CH3 Toluene	6	12.000	4
431	431	B	BORON	5	10.811	4
441	441	FB	FLUORINE di BF4-	9	18.998	1
502	401	CT	C2 di Lopes	6	12.000	4
503	401	CT	C1 di Lopes	6	12.000	4
504	403	CA	CR di Lopes	6	12.000	3
505	404	CA	CW di Lopes	6	12.000	3
506	402	HC	HR Alkane	1	1.008	1
507	402	HC	H1 di Lopes	1	1.008	1
508	406	HC	HA di Lopes	1	1.008	1
510	411	N2	NSP2-NA di Lopes	7	14.003	3
531	432	P	P DI PF6-	15	30.974	6
541	442	FP	F di PF6-	9	18.998	1
542	443	FP	F di PF6-	9	18.998	1
543	444	FP	F di PF6-	9	18.998	1
606	402	HC	HR Alkane	1	1.008	1
608	406	HC	HA di Lopes	1	1.008	1

TINKER Force Field Parameters for FF2

Van der Waals Parameters

	Class	Radius	Epsilon	Reduction
1	50	3.151	0.152	0.000
2	401	3.500	0.066	0.000
3	402	2.500	0.030	0.000
4	403	3.550	0.070	0.000
5	404	3.550	0.070	0.000
6	406	2.420	0.030	0.000
7	411	3.250	0.170	0.000
8	431	3.432	0.095	0.000
9	432	3.740	0.200	0.000
10	441	2.992	0.061	0.000
11	442	3.119	0.061	0.000
12	443	3.119	0.061	0.000
13	444	3.119	0.061	0.000

Van der Waals Scaling Factors

1-2 Atoms	0.000
1-3 Atoms	0.000
1-4 Atoms	0.500
1-5 Atoms	1.000

TINKER Force Field Parameters for FF2

Bond Stretching Parameters

	Classes	KS	Length
1	403- 406	1300.000	1.0800
2	404- 406	1300.000	1.0800
3	401- 402	1300.000	1.0900
4	404- 411	1787.000	1.3780
5	403- 411	1996.000	1.3150
6	404- 404	2176.000	1.3410
7	401- 411	1410.000	1.4660
8	401- 401	1121.000	1.5290
9	401- 403	1327.000	1.4890
10	50- 51	2216.000	0.9572
11	431- 441	1215.000	1.3930
12	432- 442	1200.000	1.6460
13	432- 443	1200.000	1.6460
14	432- 444	1200.000	1.6460

TINKER Force Field Parameters for FF2

Angle Bending Parameters

	Classes	KB	Value 1 (R-X-R)	Value 2 (R-X-H)	Value 3 (H-X-H)
1	403- 411- 404	292.600	108.000		
2	401- 411- 404	292.600	125.600		
3	401- 411- 403	292.600	126.400		
4	406- 403- 411	146.300	125.100		
5	411- 403- 411	292.600	109.800		
6	404- 404- 411	292.600	107.100		
7	406- 404- 411	146.300	122.000		
8	404- 404- 406	146.300	130.900		
9	402- 401- 411	156.200	110.700		
10	401- 401- 402	156.200	110.700		
11	401- 401- 411	418.400	112.700		
12	401- 401- 401	418.400	112.700		
13	402- 401- 402	138.100	107.800		
14	401- 403- 411	146.300	125.100		
15	402- 401- 403	156.200	110.700		
16	51- 50- 51	142.500	104.520		
17	441- 431- 441	209.300	109.500		
18	442- 432- 442	200.000	180.000		
19	443- 432- 443	200.000	180.000		
20	444- 432- 444	200.000	180.000		
21	442- 432- 443	200.000	90.000		
22	443- 432- 444	200.000	90.000		
23	442- 432- 444	200.000	90.000		

TINKER Force Field Parameters for FF2

Urey-Bradley Parameters

	Classes	KB	Distance
1	51- 50- 51	38.250	1.5139

TINKER Force Field Parameters for FF2

Improper Torsion Parameters

	Classes	KTI Values
1	411- 411- 403- 406	8.370 180.0 2
2	411- 411- 403- 401	8.370 180.0 2
3	404- 411- 404- 406	8.370 180.0 2
4	411- 404- 404- 406	9.200 180.0 2
5	403- 404- 411- 401	9.200 180.0 2
6	404- 403- 411- 401	9.200 180.0 2

TINKER Force Field Parameters for FF2

Torsional Parameters

	Classes	KT Values		
1	406- 403- 411- 401	19.460 180.0 2		
2	411- 403- 411- 401	19.460 180.0 2		
3	406- 403- 411- 404	19.460 180.0 2		
4	411- 403- 411- 404	19.460 180.0 2		
5	401- 403- 411- 401	19.460 180.0 2		
6	401- 403- 411- 404	19.460 180.0 2		
7	406- 404- 404- 406	44.980 180.0 2		
8	406- 404- 404- 411	44.980 180.0 2		
9	411- 404- 404- 411	44.980 180.0 2		
10	406- 404- 411- 401	12.550 180.0 2		
11	404- 404- 411- 401	12.550 180.0 2		
12	406- 404- 411- 403	12.550 180.0 2		
13	404- 404- 411- 403	12.550 180.0 2		
14	402- 401- 411- 404	0.519 0.0 3		
15	402- 401- 411- 403			
16	401- 401- 411- 404	-7.154 0.0 1	6.106 180.0 2	0.794 0.0 3
17	401- 401- 411- 403	-5.269 0.0 1		
18	401- 401- 401- 411	-7.480 0.0 1	3.164 180.0 2	-1.203 0.0 3
19	402- 401- 401- 411			
20	401- 401- 401- 402	1.531 0.0 3		
21	402- 401- 401- 402	1.331 0.0 3		
22	401- 401- 401- 401	7.280 0.0 1	-0.657 180.0 2	1.167 0.0 3
23	402- 401- 403- 411			

TINKER Force Field Parameters for FF2

Atomic Partial Charge Parameters

	Type	Partial Chg
1	186	-0.834
2	187	0.417
3	401	-0.180
4	402	-0.120
5	403	-0.170
6	404	-0.110
7	405	-0.130
8	406	0.060
9	407	0.130
10	408	0.210
11	409	0.070
12	410	0.150
13	414	-0.040
14	431	0.828
15	441	-0.457
16	502	0.010
17	503	-0.170
18	504	-0.070
19	505	-0.130
20	506	0.060
21	507	0.130
22	508	0.210
23	510	0.150
24	531	1.340
25	541	-0.390
26	542	-0.390
27	543	-0.390
28	606	0.060
29	608	0.210

Atomic Partial Charge Scaling Factors

1-2 Atoms	0.000
1-3 Atoms	0.000
1-4 Atoms	0.500
1-5 Atoms	1.000