

# Multi-scale Coarse-graining of Ionic Liquids

Yanting Wang, Sergei Izvekov, Tianying Yan, and Gregory A. Voth\*

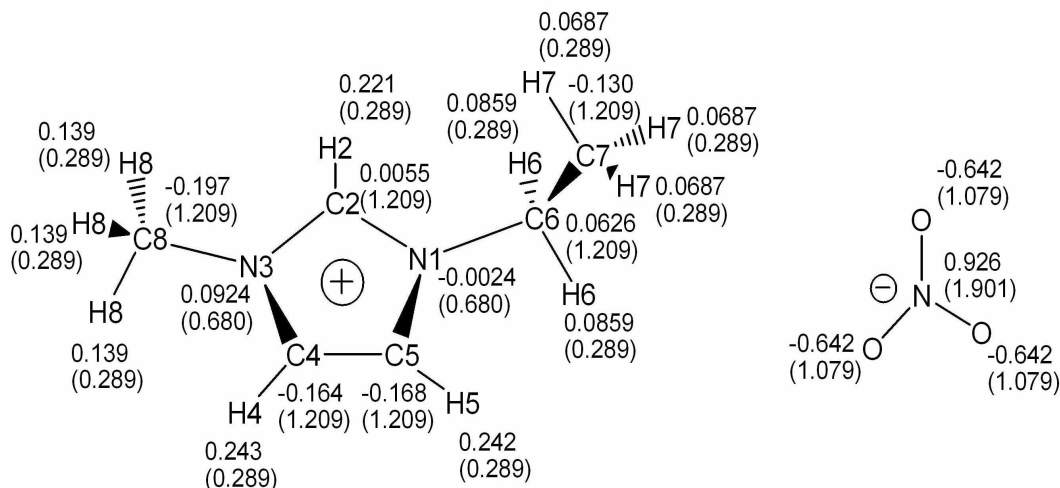
## Supporting Information

### S1. Atomistic Models

The potential energy function for the non-polarizable force field  $V_{np}$  is written as

$$V_{np} = \sum_{bonds} \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2 + \sum_{angles} \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{dihedrals} V_n \cos(n\phi - \gamma) + \sum_i \sum_{j>i} \left( 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \right). \quad (S1)$$

The RESP fitted partial charges for the atoms  $\{q_i\}$  and the atomic polarizabilities  $\{\alpha_i\}$  (in parentheses) are shown in Figure S1.



**Figure S1.** All-atom model of the EMIM<sup>+</sup>NO<sub>3</sub><sup>-</sup> ionic liquid.

The force field parameters are listed in the tables below.

**TABLE S1: Bond parameters.** [ $k_r$  in kcal/(mol Å<sup>2</sup>) and  $r_0$  in Å]

bond	$k_r$	$r_0$	bond	$k_r$	$r_0$	bond	$k_r$	$r_0$
CR-NA	954.0	1.343	CW-NA	854.0	1.381	CW-CW	1040.0	1.370
CT-NA	674.0	1.475	CT-CT	620.0	1.526	CR-H5	734.0	1.080
CW-H4	734.0	1.080	CT-H1	680.0	1.090	CT-HC	680.0	1.090
NA-OS	600.0	1.260						

**TABLE S2: Angle parameters.** [ $k_\theta$  in kcal/(mol radian<sup>2</sup>) and  $\theta_0$  in degree]

angle	$k_\theta$	$\theta_0$	angle	$k_\theta$	$\theta_0$	angle	$k_\theta$	$\theta_0$
CR-NA-CW	140.0	120.0	CW-NA-CT	140.0	125.8	CR-NA-CT	140.0	125.8
NA-CR-NA	140.0	120.0	NA-CR-H5	70.0	120.0	NA-CW-CW	140.0	120.0
NA-CW-H4	70.0	120.0	CW-CW-H4	70.0	128.2	NA-CT-CT	160.0	111.2
NA-CT-H1	70.0	109.5	CT-CT-H1	100.0	109.5	CT-CT-HC	100.0	109.5
OS-NA-OS	300.0	120.0						

**TABLE S3: Dihedral angle parameters.** [ $V_n$  in kcal/mol and  $\gamma$  in degree]

dihedral	$V_n$	$\gamma$	$n$	dihedral	$V_n$	$\gamma$	$n$
HC-CT-CT-NA	0.156	0.0	3	HC-CT-CT-H1	0.156	0.0	3
CT-NA-CR-H5	2.325	180.0	2	CT-NA-CR-NA	2.325	180.0	2
CT-NA-CW-CW	1.500	180.0	2	CT-NA-CW-H4	1.500	180.0	2
NA-CR-NA-CW	2.325	180.0	2	CR-NA-CW-H4	1.500	180.0	2
CW-NA-CR-H5	2.325	180.0	2	CR-NA-CW-CW	1.500	180.0	2
NA-CW-CW-NA	5.375	180.0	2	NA-CW-CW-H4	5.375	180.0	2
H4-CW-CW-H4	5.375	180.0	2	H5-CR-NA-NA <sup>a</sup>	1.100	180.0	2
CR-CW-NA-CT <sup>a</sup>	1.100	180.0	2	H4-CW-CW-NA <sup>a</sup>	1.100	180.0	2
OS-OS-NA-OS <sup>a</sup>	50.000	180.0	2				

<sup>a</sup>Improper torsions.

**TABLE S4: Van der Waals parameters.** [ $\epsilon$  in kcal/mol and  $\sigma$  in Å]

pair	$\epsilon$	$\sigma$	pair	$\epsilon$	$\sigma$	pair	$\epsilon$	$\sigma$
CW — CW <sup>b</sup>	0.0860	3.400	CW — NA	0.121	3.325	CW — H1	0.0371	2.936
CW — H5	0.0359	2.911	CW — HC	0.0371	3.025	CW — H4	0.0359	2.955
CT — CT	0.109	3.400	CT — H1	0.0418	2.936	CT — H5	0.0404	2.911
CT — HC	0.0418	3.025	CT — H4	0.0404	2.955	CT — NA	0.136	3.325
CT — CW	0.0968	3.400	H1 — H1	0.0160	2.471	H1 — H5	0.0155	2.446
H1 — HC	0.0160	2.560	H1 — H4	0.0155	2.491	H1 — NA	0.0522	2.861
H5 — H5	0.0150	2.422	H5 — HC	0.0155	2.536	H5 — H4	0.0150	2.466
H5 — NA	0.0505	2.836	HC — HC	0.0160	2.650	HC — H4	0.0155	2.580
HC — NA	0.0522	2.950	H4 — H4	0.0150	2.511	H4 — NA	0.0505	2.880
NA — NA	0.170	3.250	NA — OS	0.170	3.125	OS — OS	0.170	3.001
CW — OS	0.121	3.200	CT — OS	0.136	3.200	H1 — OS	0.0522	2.736
H5 — OS	0.0505	2.711	HC — OS	0.0522	2.825	H4 — OS	0.0505	2.756

<sup>b</sup>CR type atom has the same van der Waals parameters as CW atom.

## S2. Matched Non-bonded Parameters for the MS-CG Models

The matched non-bonded forces for the MS-CG models at  $T = 400$  K and  $T = 700$  K are smoothed out by a polynomial function shown in eq 17 with  $M = 16$ . Some of the smoothed forces are plotted in Figure 4. The coefficients of the polynomial  $A_{ij}^n$  are listed below, where  $i$  and  $j$  are the CG sites of A, B, C, E, and D as shown in Figure 2,  $n = 2, \dots, 16$  is the power of the polynomial terms. Atomic units are used.

**TABLE S5: Non-bonded parameters for the MS-CG models of EMIM<sup>+</sup>NO<sub>3</sub><sup>-</sup> at T = 400 K.**

$n$	$A_{AA}^n$	$A_{AB}^n$	$A_{AC}^n$
2	1.31304954530E + 02	5.67940919713E + 02	-1.27058767975E + 02
3	-1.60807641457E + 04	-6.46620173404E + 04	1.52985546186E + 04
4	8.55523714206E + 05	3.22256543744E + 06	-8.07176156315E + 05
5	-2.60334455348E + 07	-9.25405868946E + 07	2.45341447259E + 07
6	5.01516956518E + 08	1.69449228658E + 09	-4.74826073801E + 08
7	-6.38437017454E + 09	-2.06393607348E + 10	6.09832581819E + 09
8	5.42453989424E + 10	1.68720022405E + 11	-5.24141389089E + 10
9	-3.01539868273E + 11	-9.05833559313E + 11	2.95071447422E + 11
10	1.02714378443E + 12	2.98333889963E + 12	-1.01780429288E + 12
11	-1.78424342272E + 12	-4.97864142312E + 12	1.78895666101E + 12
12	5.15455220386E + 11	1.19469643597E + 12	-5.28235566232E + 11
13	1.56208195843E + 12	4.32411609282E + 12	-1.57644887929E + 12
14	1.13139173285E + 12	3.26760107086E + 12	-1.13986459033E + 12
15	5.38185766949E + 11	1.60796595061E + 12	-5.41843580824E + 11
16	2.02454283618E + 11	6.24330186287E + 11	-2.03753175820E + 11

TABLE S6: Non-bonded parameters for the CG models of EMIM<sup>+</sup>NO<sub>3</sub><sup>-</sup> at T = 400 K. (Continued)

$n$	$A_{AE}^n$	$A_{AD}^n$	$A_{BB}^n$
2	1.36893000682E + 02	-9.03359884069E + 02	5.34723710629E + 02
3	-1.59889155349E + 04	9.83775545328E + 04	-5.94434912927E + 04
4	8.21414838199E + 05	-4.65604153815E + 06	2.89115447838E + 06
5	-2.44034902217E + 07	1.26010744575E + 08	-8.09894689810E + 07
6	4.63375392176E + 08	-2.15771193537E + 09	1.44609259611E + 09
7	-5.86087740611E + 09	2.43856287906E + 10	-1.71689467121E + 10
8	4.97920053900E + 10	-1.83499721090E + 11	1.36735164705E + 11
9	-2.78014003819E + 11	8.99097029195E + 11	-7.14519265620E + 11
10	9.53546451922E + 11	-2.67237107971E + 12	2.28500522619E + 12
11	-1.66608514491E + 12	3.93172229789E + 12	-3.67028153445E + 12
12	4.63463166109E + 11	-5.54950514777E + 11	7.03758603715E + 11
13	1.50877654125E + 12	-2.96608056584E + 12	3.17172125910E + 12
14	1.12857980228E + 12	-2.27704478992E + 12	2.50574349127E + 12
15	5.53142452542E + 11	-1.11743337226E + 12	1.27737764841E + 12
16	2.14304015968E + 11	-4.30300621307E + 11	5.12564844116E + 11

TABLE S7: Non-bonded parameters for the CG models of EMIM<sup>+</sup>NO<sub>3</sub><sup>-</sup> at T = 400 K. (Continued)

$n$	$A_{BC}^n$	$A_{BE}^n$	$A_{BD}^n$
2	7.87857107343E + 02	3.30772851701E + 02	1.71465186337E + 02
3	-8.92326291816E + 04	-3.67903786580E + 04	-1.98715237265E + 04
4	4.42930156171E + 06	1.78612597019E + 06	1.00958842557E + 06
5	-1.26828056639E + 08	-4.98098641391E + 07	-2.95606352452E + 07
6	2.31782366829E + 09	8.82663173744E + 08	5.51084373687E + 08
7	-2.81959833095E + 10	-1.03636639840E + 10	-6.81306002025E + 09
8	2.30283648040E + 11	8.12729944532E + 10	5.62899481293E + 10
9	-1.23520548692E + 12	-4.15704173364E + 11	-3.03896417656E + 11
10	4.06169485887E + 12	1.28746680672E + 12	1.00054005714E + 12
11	-6.75001022516E + 12	-1.94042573413E + 12	-1.65490482990E + 12
12	1.53789759897E + 12	1.06629984320E + 11	3.62907736668E + 11
13	5.92451808991E + 12	1.79564243390E + 12	1.43774787237E + 12
14	4.56058042108E + 12	1.65884467809E + 12	1.10930016121E + 12
15	2.28071533492E + 12	9.50484434683E + 11	5.55239362820E + 11
16	8.99430259955E + 11	4.22175034119E + 11	2.19067774942E + 11

TABLE S8: Non-bonded parameters for the CG models of EMIM<sup>+</sup>NO<sub>3</sub><sup>-</sup> at T = 400 K. (Continued)

$n$	$A_{CC}^n$	$A_{CE}^n$	$A_{CD}^n$
2	$8.75494895437E + 02$	$2.29221385762E + 02$	$2.76125703153E + 01$
3	$-1.02534773020E + 05$	$-2.67222130429E + 04$	$-2.77220344759E + 03$
4	$5.27292521646E + 06$	$1.36753409917E + 06$	$1.25480890421E + 05$
5	$-1.56726797137E + 08$	$-4.04374825843E + 07$	$-3.40010425866E + 06$
6	$2.97907726364E + 09$	$7.64457259170E + 08$	$6.10077185884E + 07$
7	$-3.77715474688E + 10$	$-9.63778837016E + 09$	$-7.49160017175E + 08$
8	$3.22280384462E + 11$	$8.17564938399E + 10$	$6.27079088294E + 09$
9	$-1.81152374022E + 12$	$-4.56783422672E + 11$	$-3.45782443432E + 10$
10	$6.27604925376E + 12$	$1.57196517019E + 12$	$1.15886667754E + 11$
11	$-1.11594164107E + 13$	$-2.76907000737E + 12$	$-1.90181986127E + 11$
12	$3.46556507048E + 12$	$8.16647908389E + 11$	$2.02897041549E + 10$
13	$1.00028416427E + 13$	$2.49584621197E + 12$	$1.91248781684E + 11$
14	$7.20662901352E + 12$	$1.83165446032E + 12$	$1.76208195147E + 11$
15	$3.42086316430E + 12$	$8.83308899027E + 11$	$1.01860902950E + 11$
16	$1.28538452491E + 12$	$3.36965186903E + 11$	$4.57972495835E + 10$

TABLE S9: Non-bonded parameters for the CG models of EMIM<sup>+</sup>NO<sub>3</sub><sup>-</sup> at T = 400 K. (Continued)

$n$	$A_{EE}^n$	$A_{ED}^n$	$A_{DD}^n$
2	$3.46745063104E + 02$	$1.17686739426E + 02$	$-3.39889311899E + 01$
3	$-3.95768733192E + 04$	$-1.41620473492E + 04$	$4.13267619145E + 03$
4	$1.97790275101E + 06$	$7.44444227606E + 05$	$-2.09057007131E + 05$
5	$-5.69593095901E + 07$	$-2.24681535329E + 07$	$5.76547685645E + 06$
6	$1.04566740282E + 09$	$4.30337174564E + 08$	$-9.48193037151E + 07$
7	$-1.27627451369E + 10$	$-5.45212629018E + 09$	$9.47773614488E + 08$
8	$1.04464158638E + 11$	$4.60822682841E + 10$	$-5.55348916343E + 09$
9	$-5.60920618633E + 11$	$-2.54268340451E + 11$	$1.66754911325E + 10$
10	$1.84385245750E + 12$	$8.55578884385E + 11$	$-1.41241801234E + 10$
11	$-3.05390996346E + 12$	$-1.44994515626E + 12$	$-2.19330336978E + 10$
12	$6.59046860725E + 11$	$3.46528211304E + 11$	$-1.34400978482E + 10$
13	$2.71082648052E + 12$	$1.28751665174E + 12$	$-5.64994038273E + 09$
14	$2.12637340481E + 12$	$9.87873675653E + 11$	$-1.89745105776E + 09$
15	$1.08098840816E + 12$	$4.93388845206E + 11$	$-5.46861793673E + 08$
16	$4.33115736895E + 11$	$1.94436814881E + 11$	$-1.40937853797E + 08$



**TABLE S10: Non-bonded parameters for the CG models of EMIM<sup>+</sup>NO<sub>3</sub><sup>-</sup> at T = 700 K.**

$n$	$A_{AA}^n$	$A_{AB}^n$	$A_{AC}^n$
2	$3.72975621937E + 03$	$-2.89481341442E + 02$	$8.39748958961E + 02$
3	$-4.39909086311E + 05$	$3.46286568460E + 04$	$-9.42969764546E + 04$
4	$2.27714678100E + 07$	$-1.81585219245E + 06$	$4.63481381848E + 06$
5	$-6.80821601012E + 08$	$5.49135611014E + 07$	$-1.31258867305E + 08$
6	$1.30067493759E + 10$	$-1.05902649921E + 09$	$2.37003762947E + 09$
7	$-1.65602998896E + 11$	$1.35768013918E + 10$	$-2.84585547520E + 10$
8	$1.41767746099E + 12$	$-1.16672903011E + 11$	$2.29212731946E + 11$
9	$-7.98880364960E + 12$	$6.57587541376E + 11$	$-1.21113170470E + 12$
10	$2.77282857505E + 13$	$-2.27203277880E + 12$	$3.91600120246E + 12$
11	$-4.93696463031E + 13$	$3.99163421317E + 12$	$-6.36494173609E + 12$
12	$1.53640319909E + 13$	$-1.11908023530E + 12$	$1.27622021790E + 12$
13	$4.42813042633E + 13$	$-3.62214109505E + 12$	$5.55426253254E + 12$
14	$3.18973853788E + 13$	$-2.70770775555E + 12$	$4.37635471127E + 12$
15	$1.51400807079E + 13$	$-1.32676860774E + 12$	$2.22868244552E + 12$
16	$5.68864317512E + 12$	$-5.13956836033E + 11$	$8.93793008615E + 11$

TABLE S11: Non-bonded parameters for the CG models of EMIM<sup>+</sup>NO<sub>3</sub><sup>-</sup> at T = 700 K. (continued)

$n$	$A_{AE}^n$	$A_{AD}^n$	$A_{BB}^n$
2	5.77923907984E + 02	-7.06590416842E + 02	3.45455573597E + 02
3	-6.54026478991E + 04	7.68003524749E + 04	-3.76307586881E + 04
4	3.23618808093E + 06	-3.61854974303E + 06	1.79213570619E + 06
5	-9.21144786157E + 07	9.71662729319E + 07	-4.91598376996E + 07
6	1.66798833770E + 09	-1.64375204911E + 09	8.60214777825E + 08
7	-2.00279505568E + 10	1.82572310717E + 10	-1.00232237108E + 10
8	1.60687848564E + 11	-1.34157869498E + 11	7.84936148104E + 10
9	-8.41064175489E + 11	6.36715414100E + 11	-4.04232710578E + 11
10	2.66684358558E + 12	-1.81192950520E + 12	1.27693096786E + 12
11	-4.12824153650E + 12	2.49099871115E + 12	-2.02945712027E + 12
12	3.11170311390E + 11	-1.74302760724E + 11	3.77667108674E + 11
13	3.90663704530E + 12	-1.75643768067E + 12	1.74340042215E + 12
14	3.58224763756E + 12	-1.40469946565E + 12	1.37983699844E + 12
15	2.04696326577E + 12	-7.06184231959E + 11	7.03914385237E + 11
16	9.07886927155E + 11	-2.77330228499E + 11	2.82564452409E + 11

TABLE S12: Non-bonded parameters for the CG models of EMIM<sup>+</sup>NO<sub>3</sub><sup>-</sup> at T = 700 K. (continued)

$n$	$A_{BC}^n$	$A_{BE}^n$	$A_{BD}^n$
2	7.66883299805E + 02	2.54423653010E + 02	3.14547785096E + 02
3	-8.32434971082E + 04	-2.74834938156E + 04	-3.47291278016E + 04
4	3.94355996965E + 06	1.29371558947E + 06	1.67804152696E + 06
5	-1.07326765243E + 08	-3.49338049492E + 07	-4.66893695314E + 07
6	1.85657601777E + 09	5.98804579116E + 08	8.27107141048E + 08
7	-2.12827646325E + 10	-6.79567544947E + 09	-9.71900198191E + 09
8	1.62925786655E + 11	5.14759424874E + 10	7.62882473295E + 10
9	-8.12814421378E + 11	-2.54075068972E + 11	-3.90278020115E + 11
10	2.44916498875E + 12	7.57484106547E + 11	1.20704687781E + 12
11	-3.55751616317E + 12	-1.08779463217E + 12	-1.81146671987E + 12
12	4.59957149604E + 10	5.85665016500E + 09	8.90112152725E + 10
13	3.23145051757E + 12	9.80055355153E + 11	1.66445971262E + 12
14	3.08081902106E + 12	9.37242554833E + 11	1.54087186435E + 12
15	1.80329982230E + 12	5.49204062813E + 11	8.83545589970E + 11
16	8.16130316366E + 11	2.48701187073E + 11	3.92594499723E + 11

TABLE S13: Non-bonded parameters for the CG models of EMIM<sup>+</sup>NO<sub>3</sub><sup>-</sup> at T = 700 K. (continued)

$n$	$A_{CC}^n$	$A_{CE}^n$	$A_{CD}^n$
2	$-6.79993163595E + 02$	$-3.64020013058E + 02$	$6.27500745780E + 02$
3	$7.44932160460E + 04$	$4.10705184149E + 04$	$-6.75174858393E + 04$
4	$-3.55950027308E + 06$	$-2.02475752269E + 06$	$3.17401512656E + 06$
5	$9.75861939294E + 07$	$5.73958346653E + 07$	$-8.58269315780E + 07$
6	$-1.69721654934E + 09$	$-1.03484326252E + 09$	$1.47691750798E + 09$
7	$1.95138873635E + 10$	$1.23738379925E + 10$	$-1.68588098305E + 10$
8	$-1.49442362040E + 11$	$-9.89367859788E + 10$	$1.28585954034E + 11$
9	$7.44392880505E + 11$	$5.17152684784E + 11$	$-6.39139980170E + 11$
10	$-2.24249371855E + 12$	$-1.64716351475E + 12$	$1.91676633154E + 12$
11	$3.31895964667E + 12$	$2.61873477516E + 12$	$-2.75800983549E + 12$
12	$-4.08397811739E + 11$	$-4.68084787504E + 11$	$-2.04853617486E + 10$
13	$-2.57232593672E + 12$	$-2.22798572258E + 12$	$2.52306888832E + 12$
14	$-2.04637322293E + 12$	$-1.76696656155E + 12$	$2.46346662584E + 12$
15	$-1.03627393009E + 12$	$-9.02078200856E + 11$	$1.46926870644E + 12$
16	$-4.11409538094E + 11$	$-3.62251215393E + 11$	$6.76753637374E + 11$

TABLE S14: Non-bonded parameters for the CG models of EMIM<sup>+</sup>NO<sub>3</sub><sup>-</sup> at T = 700 K. (continued)

$n$	$A_{EE}^n$	$A_{ED}^n$	$A_{DD}^n$
2	1.20111913451E + 02	2.32984015123E + 02	-8.62171968624E + 02
3	-1.34176984015E + 04	-2.60275935630E + 04	1.04253915811E + 05
4	6.52071330655E + 05	1.27256134742E + 06	-5.54225717961E + 06
5	-1.81569530472E + 07	-3.58323718421E + 07	1.70414641981E + 08
6	3.20822155866E + 08	6.42724790762E + 08	-3.35208142631E + 09
7	-3.75603130239E + 09	-7.65683319008E + 09	4.39862994344E + 10
8	2.94202463474E + 10	6.10840478818E + 10	-3.88541870503E + 11
9	-1.50910634351E + 11	-3.19058801654E + 11	2.26337705017E + 12
10	4.72781921406E + 11	1.01721803147E + 12	-8.15155793180E + 12
11	-7.39904660413E + 11	-1.62273090894E + 12	1.52286315194E + 13
12	1.20121925834E + 11	2.97732573758E + 11	-5.72398418320E + 12
13	6.34619270668E + 11	1.38855714438E + 12	-1.37327469723E + 13
14	5.13954011171E + 11	1.09968531366E + 12	-9.34421585332E + 12
15	2.66996421661E + 11	5.61117821428E + 11	-4.23072949742E + 12
16	1.09007049346E + 11	2.25267105321E + 11	-1.52030235035E + 12