

Figure 1.  $x_M$  (mol fraction) vs Distance ( $\text{\AA}$ )

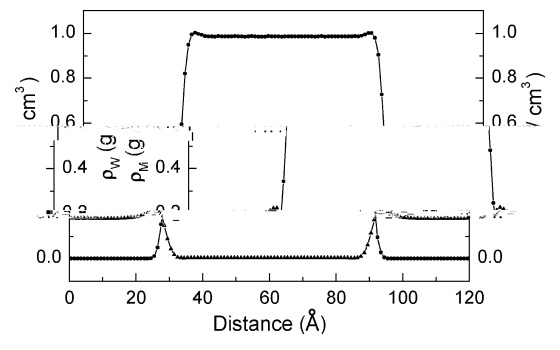


Figure 2.  $\rho$  ( $\text{cm}^{-3}$ ) vs Distance ( $\text{\AA}$ )

$x(z)$  vs Distance ( $\text{\AA}$ )

1 a. 2 a. 3 a. 4 a. 5 a. 6 a. 7 a. 8 a. 9 a. 10 a. 11 a. 12 a. 13 a. 14 a. 15 a. 16 a. 17 a. 18 a. 19 a. 20 a. 21 a. 22 a. 23 a. 24 a. 25 a. 26 a. 27 a. 28 a. 29 a. 30 a. 31 a. 32 a. 33 a. 34 a. 35 a. 36 a. 37 a. 38 a. 39 a. 40 a. 41 a. 42 a. 43 a. 44 a. 45 a. 46 a. 47 a. 48 a. 49 a. 50 a. 51 a. 52 a. 53 a. 54 a. 55 a. 56 a. 57 a. 58 a. 59 a. 60 a. 61 a. 62 a. 63 a. 64 a. 65 a. 66 a. 67 a. 68 a. 69 a. 70 a. 71 a. 72 a. 73 a. 74 a. 75 a. 76 a. 77 a. 78 a. 79 a. 80 a. 81 a. 82 a. 83 a. 84 a. 85 a. 86 a. 87 a. 88 a. 89 a. 90 a. 91 a. 92 a. 93 a. 94 a. 95 a. 96 a. 97 a. 98 a. 99 a. 100 a.

**E**

$x(t)$  vs Time (ns)

1. 2. 3. 4. 5. 6. 7. 8. 9. 10. 11. 12. 13. 14. 15. 16. 17. 18. 19. 20. 21. 22. 23. 24. 25. 26. 27. 28. 29. 30. 31. 32. 33. 34. 35. 36. 37. 38. 39. 40. 41. 42. 43. 44. 45. 46. 47. 48. 49. 50. 51. 52. 53. 54. 55. 56. 57. 58. 59. 60. 61. 62. 63. 64. 65. 66. 67. 68. 69. 70. 71. 72. 73. 74. 75. 76. 77. 78. 79. 80. 81. 82. 83. 84. 85. 86. 87. 88. 89. 90. 91. 92. 93. 94. 95. 96. 97. 98. 99. 100.

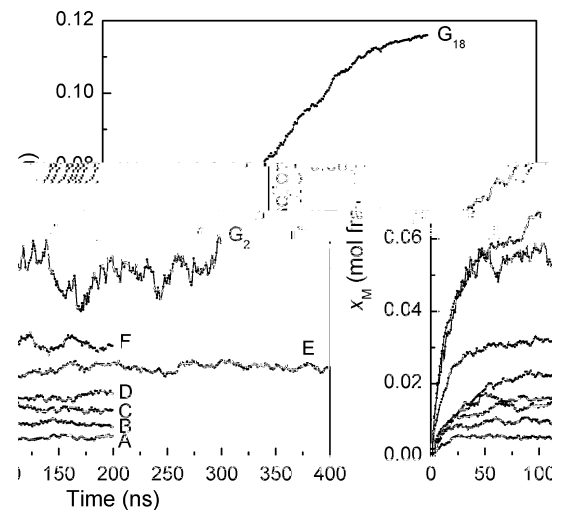


Figure 3.  $x_M$  (mol fraction) vs Time (ns)

$x(z)$  vs Distance ( $\text{\AA}$ )

1. 2. 3. 4. 5. 6. 7. 8. 9. 10. 11. 12. 13. 14. 15. 16. 17. 18. 19. 20. 21. 22. 23. 24. 25. 26. 27. 28. 29. 30. 31. 32. 33. 34. 35. 36. 37. 38. 39. 40. 41. 42. 43. 44. 45. 46. 47. 48. 49. 50. 51. 52. 53. 54. 55. 56. 57. 58. 59. 60. 61. 62. 63. 64. 65. 66. 67. 68. 69. 70. 71. 72. 73. 74. 75. 76. 77. 78. 79. 80. 81. 82. 83. 84. 85. 86. 87. 88. 89. 90. 91. 92. 93. 94. 95. 96. 97. 98. 99. 100.

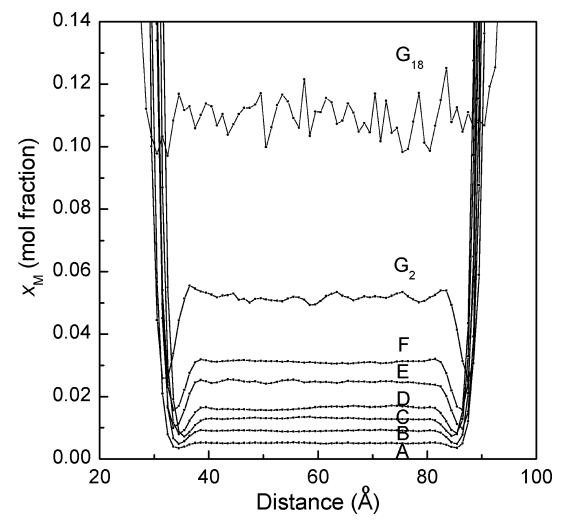


Figure 4.  $x_M$  (mol fraction) vs Distance ( $\text{\AA}$ )

$x(z)$  vs Distance ( $\text{\AA}$ )

1. 2. 3. 4. 5. 6. 7. 8. 9. 10. 11. 12. 13. 14. 15. 16. 17. 18. 19. 20. 21. 22. 23. 24. 25. 26. 27. 28. 29. 30. 31. 32. 33. 34. 35. 36. 37. 38. 39. 40. 41. 42. 43. 44. 45. 46. 47. 48. 49. 50. 51. 52. 53. 54. 55. 56. 57. 58. 59. 60. 61. 62. 63. 64. 65. 66. 67. 68. 69. 70. 71. 72. 73. 74. 75. 76. 77. 78. 79. 80. 81. 82. 83. 84. 85. 86. 87. 88. 89. 90. 91. 92. 93. 94. 95. 96. 97. 98. 99. 100.







(2) a, . . . . . *Clathrate Hydrates of Natural Gases*, 3. . . . . a a , , 200 .

(3) . . . . . *Ann. N.Y. Acad. Sci.* **2000**, 912, 7 4.

(4) . . . . . a a , . . . . . a , . . . . . J. Chem. Phys. **2005**, 123, 1 50 .

(5) ra, . . . . . a a , . . . . . J. Phys. Chem. B **2005**, 109, 1 0 0.

(6) . . . . . a , . . . . . Chem. Eng. J. **2010**, 161, 14 6

(7) . . . . . a , . . . . . J. Am. Chem. Soc. **2003**, 125, 7 0 6

(8) a , . . . . . Phys. Chem. Chem. Phys. **2008**, 10, 53.

(9) a , . . . . . a , . . . . . Science **2009**, 326, 10 5.

(10) a , . . . . . J. Am. Chem. Soc. **2010**, 132, 1 0 6

(11) a , . . . . . J. Phys. Chem. B **2010**, 114, 13 6

(12) a a a , . . . . . Phys. Chem. Chem. Phys. **2010**, 12, 150 6.

(13) r , r- . . . . . a , . . . . . Phys. Chem. Chem. Phys. **2011**, 13, 120 .

(14) r , r- . . . . . a , . . . . . Phys. Chem. Chem. Phys. **2009**, 11, 1042 .

(15) a , . . . . . a , . . . . . a , . . . . . a , . . . . . Phys. Chem. Chem. Phys. **2011**, 13, 1 51.

(16) a , . . . . . a , . . . . . J. Chem. Phys. **2012**, 136, 2245 .

(17) a , . . . . . a , . . . . . Langmuir **2012**, 28, 77 30.

(18) a , . . . . . J. Phys. Chem. Lett. **2012**, 3, 2 42.

(19) a , . . . . . J. Phys. Chem. B **2013**, 117, 1403.

(20) a , . . . . . a , . . . . . a , . . . . . ff, . . . . . a , . . . . . Gromacs User Manual version 4.5.3, 2010 . // . . . . .

(21) a a , . . . . . a , . . . . . J. Chem. Phys. **2005**, 123, 234505.

(22) . . . . . a a , . . . . . J. Am. Chem. Soc. **1984**, 106, 6 .

(23) . . . . . ra , . . . . . a , . . . . . J. Chem. Phys. **2006**, 125, 0 4510.

(24) . . . . . a , . . . . . J. Chem. Phys. **2010**, 133, 0 50 .

(25) r , r- . . . . . a , . . . . . J. Chem. Phys. **2008**, 128, 1 4504.

(26) . . . . . a , . . . . . The Atomistic Nature of Crystal Growth . . . . . 2001 . . . . . 12.

(27) . . . . . a , . . . . . a , . . . . . Geochim. Cosmochim. Acta **1992**, 56, 1451.

(28) . . . . . a , . . . . . a , . . . . . J. Phys. Chem. C **2012**, 116, 5 .

(29) a , . . . . . a a a , . . . . . a a , . . . . . Langmuir **2010**, 26, 4 .

(30) a , . . . . . a , . . . . . a , . . . . . J. Phys. Chem. C **2011**, 115, 21241.

(31) a , . . . . . a , . . . . . J. Phys. Chem. C **2012**, 116, 24 0 .

(32) . . . . . a , . . . . . Geochim. Cosmochim. Acta **2008**, 72, 412.

(33) a , . . . . . a a , . . . . . Int. J. Hydrogen Energy **2011**, 367 51.