

Supplementary Information

Surface Chemistry of Copper Metal and Copper Oxide Atomic Layer Deposition from Copper(II) Acetylacetonate: A Combined First-Principles and Reactive Molecular Dynamics Study

Xiao Hu^{a,*}, Jörg Schuster^b, Stefan E. Schulz^{a,b}, Thomas Gessner^{a,b}

^a *Technische Universität Chemnitz, Center for Microtechnologies, Chemnitz, Germany*

^b *Fraunhofer Institute for Electronic Nano Systems, Chemnitz, Germany*

* Corresponding author: Xiao Hu; E-mail: xiao.hu@zfm.tu-chemnitz.de

We have used very large models [e.g. ~5500 atoms for H-Cu(acac)₂ process] to simulate the ALD surface reaction, instead of using a small model with several repeated trajectories. Our strategy ensures obtainment of the statistically valid results for species evolution and reaction pathways. For validation purpose, we have carried out two additional calculations for the surface reaction between Cu(acac)₂ and H using different input configurations [see Figs. S1 (c~d)]. The results show that there are very minor differences among these three trajectories, indicating that our system is large enough.

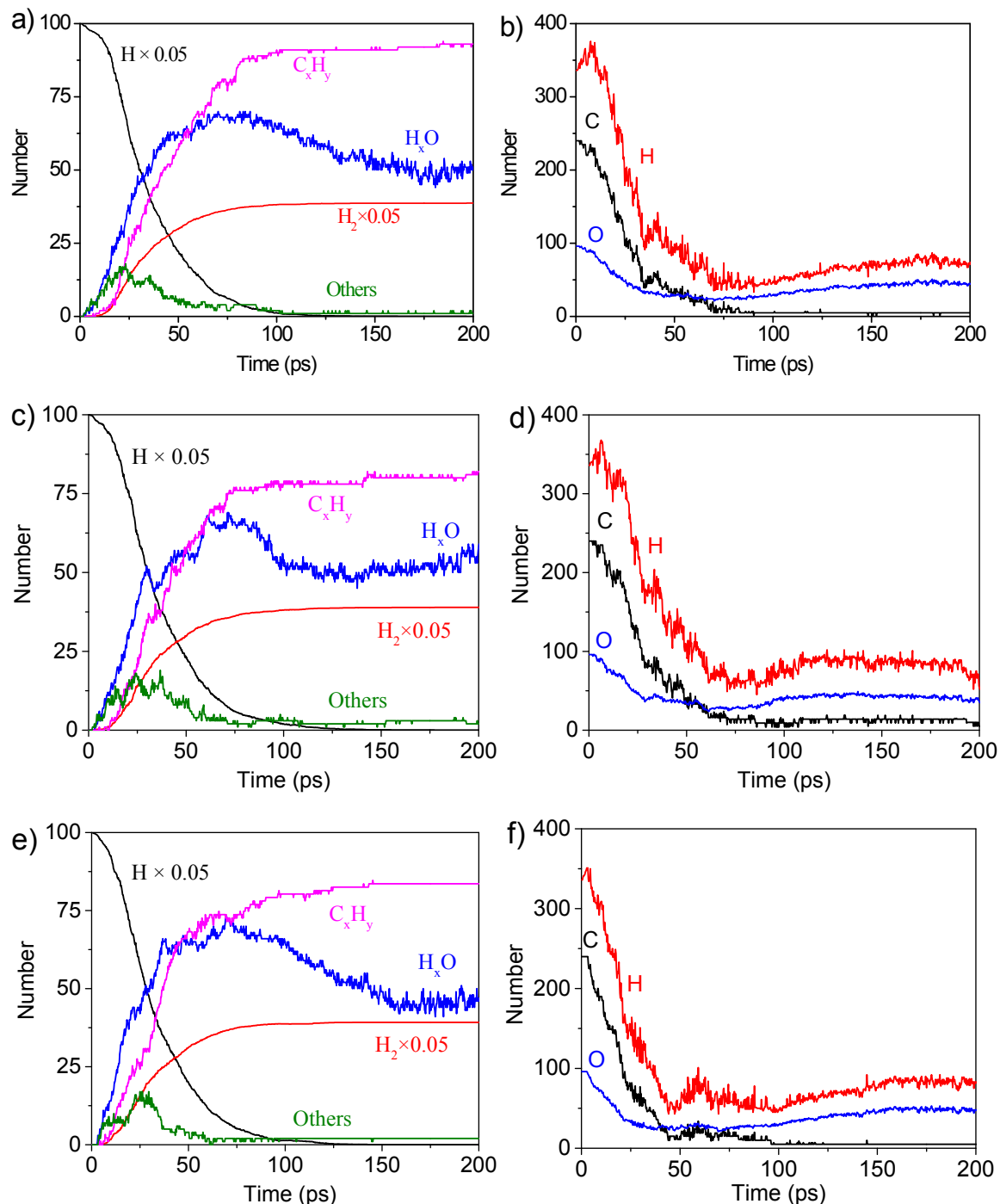


Fig. S1 Product evolutions for the surface reactions between Cu(acac)₂ and atomic H. (a) and (b) show the data presented in Fig.8 of the main text, while (c) ~ (f) show the repeated data using different input configurations.

ReaxFF parameters

(from Refs.: *J. Phys. Chem. A*, 2010, 114, 9507–9514; *J. Phys. Chem. B*, 2011, 115, 249–261; *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2012, 14, 11327–11332)

```
39  ! Number of general parameters
50.0000 !Overcoordination parameter
9.5469 !Overcoordination parameter
1.6725 !Valency angle conjugation parameter
1.7224 !Triple bond stabilisation parameter
6.8702 !Triple bond stabilisation parameter
60.4850 !C2-correction
1.0588 !Undercoordination parameter
4.6000 !Triple bond stabilisation parameter
12.1176 !Undercoordination parameter
13.3056 !Undercoordination parameter
-70.5044 !Triple bond stabilization energy
0.0000 !Lower Taper-radius
10.0000 !Upper Taper-radius
2.8793 !Not used
33.8667 !Valency undercoordination
6.0891 !Valency angle/lone pair parameter
1.0563 !Valency angle
2.0384 !Valency angle parameter
6.1431 !Not used
6.9290 !Double bond/angle parameter
0.3989 !Double bond/angle parameter: overcoord
3.9954 !Double bond/angle parameter: overcoord
-2.4837 !Not used
5.7796 !Torsion/BO parameter
10.0000 !Torsion overcoordination
1.9487 !Torsion overcoordination
-1.2327 !Conjugation 0 (not used)
2.1645 !Conjugation
1.5591 !vdWals shielding
0.1000 !Cutoff for bond order (*100)
1.7602 !Valency angle conjugation parameter
0.6991 !Overcoordination parameter
50.0000 !Overcoordination parameter
1.8512 !Valency/lone pair parameter
0.5000 !Not used
20.0000 !Not used
5.0000 !Molecular energy (not used)
0.0000 !Molecular energy (not used)
0.7903 !Valency angle conjugation parameter
10  ! Nr of atoms; cov.r; valency;a.m;Rvdw;Evdw;gammaEEM;cov.r2;#
    alfa;gammaW;valency;Eunder;Eover;chiEEM;etaEEM;n.u.
    cov.r3;Elp;Heat inc.;n.u.;n.u.;n.u.;n.u.
    ov/un;val1;n.u.;val3,vval4
C  1.3817  4.0000  12.0000  1.8903  0.1838  0.9000  1.1341  4.0000
    9.7559  2.1346  4.0000  34.9350  79.5548  5.9666  7.0000  0.0000
    1.2114  0.0000  202.2908  8.9539  34.9289  13.5366  0.8563  0.0000
    -2.8983  2.5000  1.0564  4.0000  2.9663  0.0000  0.0000  0.0000
H  0.8930  1.0000  1.0080  1.3550  0.0930  0.8203 -0.1000  1.0000
    8.2230  33.2894  1.0000  0.0000  121.1250  3.7248  9.6093  1.0000
    -0.1000  0.0000  55.1878  3.0408  2.4197  0.0003  1.0698  0.0000
    -19.4571  4.2733  1.0338  1.0000  2.8793  0.0000  0.0000  0.0000
O  1.2450  2.0000  15.9990  2.3890  0.1000  1.0898  1.0548  6.0000
    9.7300  13.8449  4.0000  37.5000  116.0768  8.5000  8.3122  2.0000
    0.9049  0.4056  68.0152  3.5027  0.7640  0.0021  0.9745  0.0000
    -3.5500  2.9000  1.0493  4.0000  2.9225  0.0000  0.0000  0.0000
N  1.2333  3.0000  14.0000  1.9324  0.1376  0.8013  1.1748  5.0000
    10.0667  7.8431  4.0000  32.2482  100.0000  7.5808  7.0000  2.0000
    1.0433  27.7285  119.9837  1.9507  4.3158  3.5229  0.9745  0.0000
    -4.3875  2.6192  1.0183  4.0000  2.8793  0.0000  0.0000  0.0000
S  1.9405  2.0000  32.0600  2.0677  0.2099  1.0336  1.5479  6.0000
    9.9575  4.9055  4.0000  52.9998  112.1416  6.5000  8.2545  2.0000
    1.4601  9.7177  71.1843  5.7487  23.2859  12.7147  0.9745  0.0000
    -11.0000  2.7466  1.0338  6.2998  2.8793  0.0000  0.0000  0.0000
Mg 1.8315  2.0000  24.3050  2.2464  0.1806  0.5020  1.0000  2.0000
    10.9186  27.1205  3.0000  38.0000  0.0000  0.9499  5.6130  0.0000
    -1.3000  0.0000  220.0000  49.9248  0.3370  0.0000  0.0000  0.0000
    -1.0823  2.3663  1.0564  6.0000  2.9663  0.0000  0.0000  0.0000
P  1.5994  3.0000  30.9738  1.7000  0.1743  1.0000  1.3000  5.0000
    9.1909  14.2932  5.0000  0.0000  0.0000  1.8292  7.2520  0.0000
    -1.0000  10.2596  1.5000  0.2205  16.7429  15.9629  0.0000  0.0000
    -2.5000  1.6114  1.0338  5.0000  2.8793  0.0000  0.0000  0.0000
```

Na 2.0300 1.0000 22.9898 2.3334 0.1481 0.8765 -1.0000 1.0000
11.0000 9.8000 1.0000 0.0000 0.0000 -3.8501 5.9459 0.0000
-1.0000 0.0000 67.5458 100.0000 10.0000 0.2500 0.8563 0.0000
-2.5766 2.5000 1.0338 6.0000 2.5791 0.0000 0.0000 0.0000
Cu 1.9202 2.0000 63.5460 1.9221 0.2826 1.0000 0.1000 1.0000
10.9889 100.0000 1.0000 0.0000 0.0000 2.7875 6.0000 0.0000
-1.0000 0.0000 80.7000 34.9555 0.4988 0.0000 0.8563 0.0000
-5.1872 3.1491 1.0000 4.0000 2.5791 0.0000 0.0000 0.0000
X -0.0998 2.0000 1.0080 2.0000 0.0000 1.0000 -0.1000 6.0000
10.0000 2.5000 4.0000 0.0000 0.0000 8.5000 1.5000 0.0000
-0.1000 0.0000 -2.3700 8.7410 13.3640 0.6690 0.9745 0.0000
-11.0000 2.7466 1.0338 4.0000 2.8793 0.0000 0.0000 0.0000
40 ! Nr of bonds; Edis1;LPpen;n.u.;pbe1;pbo5;13corr;pbo6
pbe2;pbo3;pbo4;Etrip;pbo1;pbo2;ovcorr
1 1 158.2004 99.1897 78.0000 -0.7738 -0.4550 1.0000 37.6117 0.4147
0.4590 -0.1000 9.1628 1.0000 -0.0777 6.7268 1.0000 0.0000
1 2 169.4760 0.0000 0.0000 -0.6083 0.0000 1.0000 6.0000 0.7652
5.2290 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0500 6.9136 0.0000 0.0000
2 2 153.3934 0.0000 0.0000 -0.4600 0.0000 1.0000 6.0000 0.7300
6.2500 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0790 6.0552 0.0000 0.0000
1 3 164.4303 82.6772 60.8077 -0.3739 -0.2351 1.0000 10.5036 1.0000
0.4475 -0.2288 7.0250 1.0000 -0.1363 4.8734 0.0000 0.0000
3 3 142.2858 145.0000 50.8293 0.2506 -0.1000 1.0000 29.7503 0.6051
0.3451 -0.1055 9.0000 1.0000 -0.1225 5.5000 1.0000 0.0000
1 4 134.1215 140.2179 79.9745 0.0163 -0.1428 1.0000 27.0617 0.2000
0.1387 -0.3681 7.1611 1.0000 -0.1000 5.0825 1.0000 0.0000
3 4 130.8596 169.4551 40.0000 0.3837 -0.1639 1.0000 35.0000 0.2000
1.0000 -0.3579 7.0004 1.0000 -0.1193 6.8773 1.0000 0.0000
4 4 157.9384 82.5526 152.5336 0.4010 -0.1034 1.0000 12.4261 0.5828
0.1578 -0.1509 11.9186 1.0000 -0.0861 5.4271 1.0000 0.0000
2 3 160.0000 0.0000 0.0000 -0.5725 0.0000 1.0000 6.0000 0.5626
1.1150 1.0000 0.0000 0.0000 -0.0920 4.2790 0.0000 0.0000
2 4 188.1449 0.0000 0.0000 -0.3819 0.0000 1.0000 6.0000 0.2889
7.6213 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0405 6.0876 0.0000 0.0000
1 5 128.9942 74.5848 55.2528 0.1035 -0.5211 1.0000 18.9617 0.6000
0.2949 -0.2398 8.1175 1.0000 -0.1029 5.6731 1.0000 0.0000
2 5 151.5159 0.0000 0.0000 -0.4721 0.0000 1.0000 6.0000 0.6000
9.4366 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0290 7.0050 1.0000 0.0000
3 5 0.0000 0.0000 0.0000 0.5563 -0.4038 1.0000 49.5611 0.6000
0.4259 -0.4577 12.7569 1.0000 -0.1100 7.1145 1.0000 0.0000
4 5 0.0000 0.0000 0.0000 0.4438 -0.2034 1.0000 40.3399 0.6000
0.3296 -0.3153 9.1227 1.0000 -0.1805 5.6864 1.0000 0.0000
5 5 96.1871 93.7006 68.6860 0.0955 -0.4781 1.0000 17.8574 0.6000
0.2723 -0.2373 9.7875 1.0000 -0.0950 6.4757 1.0000 0.0000
2 6 58.6896 0.0000 0.0000 -0.0203 -0.1418 1.0000 13.1260 0.0230
8.2136 -0.1310 0.0000 1.0000 -0.2692 6.4254 0.0000 24.4461
3 6 87.0227 0.0000 43.3991 0.0030 -0.3000 1.0000 36.0000 0.0250
0.0087 -0.2500 12.0000 1.0000 -0.0439 6.6073 1.0000 24.4461
6 6 32.3808 0.0000 0.0000 -0.0076 -0.2000 0.0000 16.0000 0.2641
4.8726 -0.2000 10.0000 1.0000 -0.0729 4.6319 0.0000 0.0000
1 7 110.0000 92.0000 0.0000 0.2171 -0.1418 1.0000 13.1260 0.6000
0.3601 -0.1310 10.7257 1.0000 -0.0869 5.3302 1.0000 0.0000
2 7 0.1466 0.0000 0.0000 0.2250 -0.1418 1.0000 13.1260 0.6000
0.3912 -0.1310 0.0000 1.0000 -0.1029 9.3302 0.0000 0.0000
3 7 202.5868 164.1808 0.0000 0.5506 -0.5000 1.0000 25.0000 0.4300
0.0912 -0.1285 16.0342 1.0000 -0.2008 6.2678 1.0000 0.0000
4 7 130.0000 0.0000 0.0000 0.2171 -0.1418 1.0000 13.1260 0.6000
0.3601 -0.1310 10.7257 1.0000 -0.0869 5.3302 1.0000 0.0000
6 7 0.1000 0.0000 0.0000 0.2500 -0.5000 1.0000 35.0000 0.6000
0.5000 -0.5000 20.0000 1.0000 -0.2000 10.0000 1.0000 0.0000
7 7 0.0000 0.0000 0.0000 0.2171 -0.5000 1.0000 35.0000 0.6000
0.5000 -0.5000 20.0000 1.0000 -0.2000 10.0000 1.0000 0.0000
2 8 0.0000 0.0000 0.0000 -1.0000 -0.3000 1.0000 36.0000 0.7000
10.1151 -0.3500 25.0000 1.0000 -0.1053 8.2003 1.0000 0.0000
3 8 76.0753 0.0000 0.0000 -0.4452 -0.3000 1.0000 36.0000 0.6433
5.6834 -0.3500 25.0000 1.0000 -0.0539 8.0273 1.0000 0.0000
4 8 0.0000 0.0000 0.0000 -1.0000 -0.3000 1.0000 36.0000 0.7000
10.1151 -0.3500 25.0000 1.0000 -0.1053 8.2003 1.0000 0.0000
6 8 0.1000 0.0000 0.0000 0.2500 -0.5000 1.0000 35.0000 0.6000
0.5000 -0.5000 20.0000 1.0000 -0.2000 10.0000 1.0000 0.0000
7 8 0.1000 0.0000 0.0000 0.2500 -0.5000 1.0000 35.0000 0.6000
0.5000 -0.5000 20.0000 1.0000 -0.2000 10.0000 1.0000 0.0000
8 8 27.8052 0.0000 0.0000 0.4022 0.3000 0.0000 25.0000 0.4894
0.6222 -0.4000 12.0000 1.0000 -0.0500 5.3362 0.0000 0.0000
4 6 0.0000 0.0000 0.0000 -1.0000 -0.3000 1.0000 36.0000 0.7000
10.1151 -0.3500 25.0000 1.0000 -0.1053 8.2003 1.0000 0.0000
1 9 0.0000 0.0000 0.0000 0.2000 -0.1418 1.0000 13.1260 0.5000

	0.5000	-0.2000	20.0000	1.0000	-0.1000	9.0000	0.0000	0.0000
2 9	0.0000	0.0000	0.0000	0.2000	-0.1418	1.0000	13.1260	0.5000
	0.5000	-0.2000	20.0000	1.0000	-0.1000	9.0000	0.0000	0.0000
3 9	81.4346	0.0000	0.0000	-0.1594	-0.3000	1.0000	36.0000	0.0025
	0.2904	-0.2500	12.0000	1.0000	-0.0742	9.3638	0.0000	0.0000
4 9	96.5322	0.0000	0.0000	0.9970	-0.3000	1.0000	36.0000	0.5095
	0.7247	-0.2500	12.0000	1.0000	-0.1175	9.9985	0.0000	0.0000
9 9	73.6263	0.0000	0.0000	0.0209	-0.2000	0.0000	16.0000	0.3414
	0.4703	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1319	5.9254	0.0000	0.0000
2 10	192.2699	0.0000	0.0000	-0.4064	-0.2000	0.0000	16.0000	0.3162
	1.0201	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1078	5.2373	0.0000	0.0000
3 10	0.0000	0.0000	0.0000	0.5000	-0.2000	0.0000	16.0000	0.5000
	1.0001	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000	0.0000
9 10	142.0000	0.0000	0.0000	-0.1000	-0.2000	0.0000	16.0000	0.2561
	1.3569	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1105	5.1362	0.0000	0.0000
10 10	109.2500	0.0000	0.0000	0.1803	-0.2000	0.0000	16.0000	0.3356
	0.9228	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1178	5.6715	0.0000	0.0000
21	! Nr of off-diagonal terms; Ediss;Ro;gamma;rsigma;pi;pi2							
1 2	0.1239	1.4004	9.8467	1.1210	-1.0000	-1.0000		
2 3	0.0283	1.2885	10.9190	0.9215	-1.0000	-1.0000		
2 4	0.0686	1.5116	10.0161	0.9428	-1.0000	-1.0000		
1 3	0.1345	1.8422	9.7725	1.2835	1.1576	1.0637		
1 4	0.1447	1.8766	9.7990	1.3436	1.1885	1.1363		
3 4	0.1048	2.0003	10.1220	1.3173	1.1096	1.0206		
1 5	0.1408	1.8161	9.9393	1.7986	1.3021	1.4031		
2 5	0.0895	1.6239	10.0104	1.4640	-1.0000	-1.0000		
3 5	0.1022	1.9887	10.0605	1.5799	1.4000	-1.0000		
4 5	0.1505	1.9000	10.5104	1.8000	1.4000	-1.0000		
2 6	0.0100	1.6000	13.2979	1.8670	-1.0000	-1.0000		
3 6	0.0809	1.7000	11.4606	1.5177	-1.0000	-1.0000		
3 7	0.0611	1.7624	10.2685	1.7989	1.4523	-1.0000		
6 7	0.1801	1.8566	9.8498	0.1000	-1.0000	-1.0000		
3 8	0.1592	1.8283	11.7256	1.6655	-1.0000	-1.0000		
1 9	0.0500	1.7500	12.3500	0.1000	-1.0000	-1.0000		
2 9	0.0300	1.5200	12.5000	0.1000	-1.0000	-1.0000		
3 9	0.0348	1.7637	12.3562	1.7228	-1.0000	-1.0000		
4 9	0.0478	1.7704	12.8051	1.6100	-1.0000	-1.0000		
2 10	0.1000	1.7500	10.5000	1.2000	-1.0000	-1.0000		
9 10	0.1570	2.1420	10.9943	1.7819	-1.0000	-1.0000		
104	! Nr of angles;at1;at2;at3;Theta;o;ka;kb;pv1;pv2							
1 1 1	59.0573	30.7029	0.7606	0.0000	0.7180	6.2933	1.1244	
1 1 2	65.7758	14.5234	6.2481	0.0000	0.5665	0.0000	1.6255	
2 1 2	70.2607	25.2202	3.7312	0.0000	0.0050	0.0000	2.7500	
1 2 2	0.0000	0.0000	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
1 2 1	0.0000	3.4110	7.7350	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
2 2 2	0.0000	27.9213	5.8635	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
1 1 3	53.9517	7.8968	2.6122	0.0000	3.0000	58.6562	1.0338	
3 1 3	76.9627	44.2852	2.4177	-25.3063	1.6334	-50.0000	2.7392	
1 1 4	79.7483	21.2779	7.5000	0.0000	1.1261	50.0000	1.5236	
3 1 4	73.9544	12.4661	7.0000	0.0000	1.1261	0.0000	1.1880	
4 1 4	90.0000	20.5594	7.4616	0.0000	1.1261	0.0000	1.5562	
2 1 3	65.0000	16.3141	5.2730	0.0000	0.4448	0.0000	1.4077	
2 1 4	74.2929	31.0883	2.6184	0.0000	0.1000	0.0000	1.0500	
1 2 4	0.0000	0.0019	6.3000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
1 3 1	72.6199	42.5510	0.7205	0.0000	2.9294	0.0000	1.3096	
1 3 3	81.9029	32.2258	1.7397	0.0000	0.9888	68.1072	1.7777	
1 3 4	82.4890	31.4554	0.9953	0.0000	3.0000	0.0000	1.0783	
3 3 3	80.7324	30.4554	0.9953	0.0000	3.0000	50.0000	1.0783	
3 3 4	84.3637	31.4554	0.9953	0.0000	3.0000	0.0000	1.0783	
4 3 4	89.7071	31.4554	0.9953	0.0000	3.0000	0.0000	1.1519	
1 3 2	70.1101	13.1217	4.4734	0.0000	0.8433	0.0000	3.0000	
2 3 3	75.6935	50.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.1680	
2 3 4	75.6201	18.7919	0.9833	0.0000	0.1000	0.0000	1.0500	
2 3 2	85.8000	9.8453	2.2720	0.0000	2.8635	0.0000	1.5800	
1 4 1	79.8213	7.0343	1.2383	0.0000	2.9701	0.0000	1.2178	
1 4 3	103.3204	33.0381	0.5787	0.0000	2.9701	0.0000	1.2178	
1 4 4	50.0000	25.3257	4.7701	0.0000	2.9701	0.0000	1.2199	
3 4 3	74.1978	42.1786	1.7845	-18.0069	2.9701	0.0000	1.2178	
3 4 4	74.8600	43.7354	1.1572	-0.9193	2.9701	0.0000	1.2178	
4 4 4	75.0538	14.8267	5.2794	0.0000	2.9701	0.0000	1.2178	
1 4 2	68.0427	29.7566	1.0683	0.0000	0.3531	0.0000	1.4794	
2 4 3	81.3686	40.0712	2.2396	0.0000	0.3531	0.0000	1.4794	
2 4 4	83.0104	43.4766	1.5328	0.0000	0.3531	0.0000	1.4794	
2 4 2	78.8310	17.9747	3.8083	0.0000	0.0222	0.0000	1.9986	
1 2 3	0.0000	25.0000	3.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0400	
1 2 4	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
1 2 5	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	

3	2	3	0.0000	15.0000	2.8900	0.0000	0.0000	0.0000	2.8774
3	2	4	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
4	2	4	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
2	2	3	0.0000	8.5744	3.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0421
2	2	4	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
1	1	5	74.4180	33.4273	1.7018	0.1463	0.5000	0.0000	1.6178
1	5	1	79.7037	28.2036	1.7073	0.1463	0.5000	0.0000	1.6453
2	1	5	63.3289	29.4225	2.1326	0.0000	0.5000	0.0000	3.0000
1	5	2	85.9449	38.3109	1.2492	0.0000	0.5000	0.0000	1.1000
1	5	5	85.6645	40.0000	2.9274	0.1463	0.5000	0.0000	1.3830
2	5	2	83.8555	5.1317	0.4377	0.0000	0.5000	0.0000	3.0000
2	5	5	97.0064	32.1121	2.0242	0.0000	0.5000	0.0000	2.8568
2	2	5	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
5	4	5	62.0000	33.4273	1.7018	0.1463	0.5000	0.0000	1.0500
3	5	3	77.0699	39.4349	2.1313	-30.0000	0.9567	0.0000	1.1483
1	5	3	70.0000	35.0000	3.4223	0.0000	1.3550	0.0000	1.2002
1	5	4	70.0000	35.0000	3.4223	0.0000	1.3550	0.0000	1.2002
3	5	4	70.0000	35.0000	3.4223	0.0000	1.3550	0.0000	1.2002
5	1	7	70.0000	35.0000	3.4223	0.0000	1.3550	0.0000	1.2002
1	3	5	73.0990	33.8942	1.2098	0.0000	0.8161	0.0000	1.1776
3	3	5	83.9753	31.0715	3.5590	0.0000	0.8161	0.0000	1.1776
2	3	5	76.9521	20.0000	2.0903	0.0000	1.0000	0.0000	1.0400
2	6	2	0.0000	49.8261	0.2093	0.0000	2.0870	0.0000	2.2895
2	2	6	0.0000	39.7818	3.1505	0.0000	1.1296	0.0000	1.1110
6	2	6	0.0000	0.5047	0.8000	0.0000	0.8933	0.0000	4.6650
2	6	6	0.0000	8.7037	0.0827	0.0000	3.5597	0.0000	1.1198
3	6	3	0.0000	9.2317	0.1000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0920
6	3	6	0.0008	25.0000	8.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3.0000
2	3	6	66.0423	5.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
2	6	3	0.0000	0.5000	0.1000	0.0000	1.0000	0.0000	3.0000
3	3	6	70.0000	20.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
3	7	3	88.6293	18.2614	0.8145	0.0000	-0.1780	0.0000	2.3661
2	3	7	75.0000	7.8005	0.9394	0.0000	1.3523	0.0000	1.0400
3	3	7	60.0000	40.0000	4.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0400
3	2	7	0.0000	10.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0400
6	3	7	41.7798	3.5596	7.5000	0.0000	-0.2621	0.0000	1.0400
7	3	7	50.6740	13.3258	0.1000	0.0000	1.0718	0.0000	1.1254
1	3	7	76.8677	5.4250	3.1105	0.0000	-0.0827	0.0000	2.1396
2	7	3	75.0000	25.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
3	7	7	70.0000	25.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
3	9	3	96.2265	4.5610	12.0000	0.0000	0.3211	0.0000	1.5204
3	9	3	0.0000	9.1552	7.9919	0.0000	0.1660	0.0000	1.5386
9	3	9	100.0000	10.1065	6.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3.6601
2	3	9	55.0417	3.5032	3.9979	0.0000	1.5171	0.0000	1.0400
3	3	9	70.0000	30.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
3	9	9	66.7783	14.3146	0.7911	0.0000	1.0000	0.0000	1.2333
3	9	10	95.2122	5.7090	12.0000	0.0000	0.2248	0.0000	2.8936
3	9	10	0.0000	9.0054	7.9511	0.0000	0.1482	0.0000	1.6245
9	10	9	0.0000	15.0054	2.5000	0.0000	1.0000	0.0000	1.5000
9	9	10	58.0000	5.0000	2.5000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2280
10	9	10	38.0000	30.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0500
3	2	10	0.0000	15.0000	2.8900	0.0000	0.0000	0.0000	2.8774
3	9	4	100.0000	28.1532	12.0000	0.0000	0.2932	0.0000	1.6489
3	9	4	0.0000	22.7457	2.9039	0.0000	0.5593	0.0000	1.9764
4	9	4	87.0081	27.6432	3.9735	0.0000	4.0000	0.0000	1.4578
4	9	4	0.0000	22.8998	3.1077	0.0000	3.0000	0.0000	1.0696
9	4	9	100.0000	10.1065	6.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3.6601
2	4	9	80.0000	3.5601	3.3645	0.0000	1.5171	0.0000	1.0400
3	4	9	70.0000	30.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
4	3	9	70.0000	30.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
4	4	9	70.0000	30.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
4	9	9	66.7783	14.3146	0.7911	0.0000	1.0000	0.0000	1.2333
4	9	10	95.2122	5.7090	12.0000	0.0000	0.2248	0.0000	2.8936
4	9	10	0.0000	9.0054	7.9511	0.0000	0.1482	0.0000	1.6245
4	2	10	0.0000	15.0000	2.8900	0.0000	0.0000	0.0000	2.8774
1	3	9	55.0000	15.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.5000
1	4	9	55.0000	15.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.5000
54	! Nr of torsions;at1;at2;at3;at4;;V1;V2;V3;V2(BO);vconj;n.u;n								
1	1	1	1	-0.2500	34.7453	0.0288	-6.3507	-1.6000	0.0000
1	1	1	2	-0.2500	29.2131	0.2945	-4.9581	-2.1802	0.0000
2	1	1	2	-0.2500	31.2081	0.4539	-4.8923	-2.2677	0.0000
1	1	1	3	1.2799	20.7787	-0.5249	-2.5000	-1.0000	0.0000
2	1	1	3	1.9159	19.8113	0.7914	-4.6995	-1.0000	0.0000
3	1	1	3	-1.4477	16.6853	0.6461	-4.9622	-1.0000	0.0000
1	1	3	1	0.4816	19.6316	-0.0057	-2.5000	-1.0000	0.0000
1	1	3	2	1.2044	80.0000	-0.3139	-6.1481	-1.0000	0.0000
2	1	3	1	-2.5000	31.0191	0.6165	-2.7733	-2.9807	0.0000

2	1	3	2	-2.4875	70.8145	0.7582	-4.2274	-3.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	3	-0.3566	10.0000	0.0816	-2.6110	-1.9631	0.0000	0.0000
2	1	3	3	-1.4383	80.0000	1.0000	-3.6877	-2.8000	0.0000	0.0000
3	1	3	1	-1.1390	78.0747	-0.0964	-4.5172	-3.0000	0.0000	0.0000
3	1	3	2	-2.5000	70.3345	-1.0000	-5.5315	-3.0000	0.0000	0.0000
3	1	3	3	-2.0234	80.0000	0.1684	-3.1568	-2.6174	0.0000	0.0000
1	3	3	1	1.1637	-17.3637	0.5459	-3.6005	-2.6938	0.0000	0.0000
1	3	3	2	-2.1289	12.8382	1.0000	-5.6657	-2.9759	0.0000	0.0000
2	3	3	2	2.5000	-22.9397	0.6991	-3.3961	-1.0000	0.0000	0.0000
1	3	3	3	2.5000	-25.0000	1.0000	-2.5000	-1.0000	0.0000	0.0000
2	3	3	3	-2.5000	-2.5103	-1.0000	-2.5000	-1.0000	0.0000	0.0000
3	3	3	3	-2.5000	-25.0000	1.0000	-2.5000	-1.0000	0.0000	0.0000
0	1	2	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	2	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	3	0	0.0000	0.1000	0.0200	-2.5415	0.0000	0.0000	0.0000
0	1	1	0	0.0000	50.0000	0.3000	-4.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
0	3	3	0	0.5511	25.4150	1.1330	-5.1903	-1.0000	0.0000	0.0000
0	1	4	0	0.2176	40.4126	0.3535	-3.9875	-2.0051	0.0000	0.0000
0	2	4	0	-1.5000	0.1032	0.0100	-5.0965	0.0000	0.0000	0.0000
0	3	4	0	1.1397	61.3225	0.5139	-3.8507	-2.7831	0.0000	0.0000
0	4	4	0	0.7265	44.3155	1.0000	-4.4046	-2.0000	0.0000	0.0000
4	1	4	4	-0.0949	8.7582	0.3310	-7.9430	-2.0000	0.0000	0.0000
0	1	5	0	4.0885	78.7058	0.1174	-2.1639	0.0000	0.0000	0.0000
0	5	5	0	-0.0170	-56.0786	0.6132	-2.2092	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	5	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	6	6	0	0.0000	0.0000	0.1200	-2.4426	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	6	0	0.0000	0.0000	0.1200	-2.4847	0.0000	0.0000	0.0000
0	3	6	0	0.0000	0.0000	0.1200	-2.4703	0.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	3	-0.0002	20.1851	0.1601	-9.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
1	3	3	1	0.0002	80.0000	-1.5000	-4.4848	-2.0000	0.0000	0.0000
3	1	3	3	-0.1583	20.0000	1.5000	-9.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
1	1	1	7	0.0000	19.3871	0.0103	-25.5765	-1.7255	0.0000	0.0000
7	1	1	7	0.0000	80.5586	0.1104	-8.0928	-1.7255	0.0000	0.0000
0	1	7	0	4.0000	45.8264	0.9000	-4.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	7	7	0	4.0000	45.8264	0.9000	-4.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2	1	3	7	-1.5000	13.7486	0.1710	-3.7686	0.0000	0.0000	0.0000
2	3	7	3	-0.3120	-1.7990	0.2371	-3.2710	0.0000	0.0000	0.0000
1	3	7	3	-1.5000	-2.5000	0.6794	-2.5000	0.0000	0.0000	0.0000
7	3	7	3	-1.5000	7.4600	-0.9075	-9.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2	3	9	3	-1.5000	6.8333	-0.1978	-1.4683	0.0000	0.0000	0.0000
2	3	9	4	-0.6181	7.1542	-0.0047	-1.6577	0.0000	0.0000	0.0000
2	4	9	3	-1.5000	1.7820	-1.0000	-5.4916	0.0000	0.0000	0.0000
2	4	9	4	-0.1959	2.3626	-1.0000	-3.0702	0.0000	0.0000	0.0000
2	1	4	9	0.0000	10.0000	0.3000	-6.0000	-1.0000	0.0000	0.0000
2	1	4	2	0.0000	10.0000	0.3000	-6.0000	-1.0000	0.0000	0.0000
9	! Nr of hydrogen bonds:at1;at2;at3;Rhb;Dehb;vhb1									
3	2	3		2.1200	-3.5800	1.4500	19.5000			
3	2	4		1.7207	-4.0250	1.4500	19.5000			
4	2	3		1.5182	-3.8664	1.4500	19.5000			
4	2	4		1.9326	-5.8272	1.4500	19.5000			
3	2	5		1.5000	-2.0000	1.4500	19.5000			
4	2	5		1.5000	-2.0000	1.4500	19.5000			
5	2	3		1.5000	-2.0000	1.4500	19.5000			
5	2	4		1.5000	-2.0000	1.4500	19.5000			
5	2	5		1.5000	-2.0000	1.4500	19.5000			