

```
Reactive MD-force field with Ca and Mg charges fixed to 2- 2021
39      ! Number of general parameters
50.0000 !Overcoordination parameter
9.5469  !Overcoordination parameter
26.5405 !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
-55.1978 !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/B0 parameter
10.0000 !Torsion overcoordination
1.9487  !Torsion overcoordination
-1.2327 !Conjugation 0 (not used)
2.1645  !Conjugation
1.5591  !vdWaals shielding
0.1000  !Cutoff for bond order (*100)
2.1365  !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)
2.6962  !Valency angle conjugation parameter
9      ! Nr of atoms; cov.r; valency;a.m;Rvdw;Evdw;gammaEEM;cov.r2;#
      alfa;gammavdW;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  202.6057  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	61.6606	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	59.0626	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							
Fe	1.9506	3.0000	55.8450	2.0308	0.1274	0.7264	-1.0000
3.0000							
11.0534	2.2637	3.0000	0.0000	18.3725	1.2457	7.3021	
0.0000							
-1.2000	0.0000	66.4838	30.0000	1.0000	0.0000	0.8563	
0.0000							
-16.2040	2.7917	1.0338	6.0000	2.5791	0.0000	0.0000	
0.0000							
Cl	1.7140	1.0000	35.4500	1.9139	0.2000	0.3837	-1.0000
7.0000							
11.5345	10.1330	1.0000	0.0000	0.0000	9.9614	6.5316	
0.0000							
-1.0000	3.5750	143.1770	6.2293	5.2294	0.1542	0.8563	
0.0000							
-10.2080	2.9867	1.0338	6.2998	2.5791	0.0000	0.0000	
0.0000							
Si	2.1932	4.0000	28.0600	1.8951	0.1737	0.8112	1.2962
4.0000							
11.3429	5.2054	4.0000	21.7115	139.9309	4.0081	5.7104	
0.0000							
-1.0000	0.0000	128.2031	9.0751	23.8188	0.8381	0.8563	
0.0000							
-4.1684	2.0754	1.0338	4.0000	2.5791	0.0000	0.0000	
0.0000							
Al	2.1967	3.0000	26.9820	2.3738	0.2328	0.4558	-1.6836
3.0000							
9.4002	3.9009	3.0000	0.0076	16.5151	1.6032	6.7003	
0.0000							
-1.0000	0.0000	78.4675	20.0000	0.2500	0.0000	0.8563	
0.0000							
-23.1826	1.5000	1.0338	8.0000	2.5791	0.0000	0.0000	

0.0000								
Ca	0.0000	0.0000	40.0870	2.7005	0.0000	0.6000	0.0000	
0.0000								
	0.0000	27.5993	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
0.0000								
	0.0000	0.0000	220.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
0.0000								
	0.0000	0.0000	1.0564	6.2998	2.9663	0.0000	0.0000	
0.0000								
Mg	0.0000	0.0000	24.3050	2.2494	0.0000	0.5536	0.0000	
0.0000								
	0.0000	4.4030	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
0.0000								
	0.0000	0.0000	23.0445	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
0.0000								
	0.0000	0.0000	1.0564	6.2998	2.9663	0.0000	0.0000	
0.0000								
23	! 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	0.0000	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	0.0000	0.0000	1.0000	-0.0790	6.0552	0.0000	
0.0000								
1 3	158.6946	107.4583	23.3136	-0.4240	-0.2029	1.0000	19.7207	
1.0000								
	0.5322	-0.2871	9.2845	1.0000	-0.1406	5.6488	0.0000	
0.0000								
3 3	0.0000	0.0000	0.0000	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								
2 3	160.0000	0.0000	0.0000	-0.5725	0.0000	1.0000	6.0000	
0.5626								
	1.1150	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0920	4.2790	0.0000	
0.0000								
1 4	133.0514	0.0000	0.0000	1.0000	-0.3000	1.0000	36.0000	
0.0673								
	0.2350	-0.3500	15.0000	1.0000	-0.1143	4.5217	1.0000	
0.0000								
2 4	105.0054	0.0000	0.0000	-0.0717	0.0000	0.0000	6.0000	
0.0505								
	0.1000	1.0000	0.0000	1.0000	-0.1216	4.5062	0.0000	

0.0000								
3 4	65.7713	0.0000	0.0000	0.1366	-0.3000	1.0000	36.0000	
0.0494								
	0.9495	-0.3500	15.0000	1.0000	-0.0555	7.9897	1.0000	
0.0000								
4 4	38.7471	0.0000	0.0000	0.3595	-0.2000	0.0000	16.0000	
0.2749								
	1.0000	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.0771	6.4477	0.0000	
0.0000								
2 5	109.1686	0.0000	0.0000	-0.1657	-0.2000	0.0000	16.0000	
1.2500								
	2.8463	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1111	5.2687	0.0000	
0.0000								
3 5	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								
4 5	0.0000	0.0000	0.0000	0.2500	-0.2000	0.0000	16.0000	
0.5000								
	0.5000	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	0.0000	
0.0000								
5 5	0.2500	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								
1 6	0.0000	0.0000	0.0000	-0.6528	-0.3000	0.0000	36.0000	
0.5000								
	10.0663	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000	
0.0000								
2 6	250.0000	0.0000	0.0000	-0.7128	0.0000	1.0000	6.0000	
0.1186								
	18.5790	1.0000	0.0000	1.0000	-0.0731	7.4983	0.0000	
0.0000								
3 6	261.9074	5.9533	0.0000	-0.6223	-0.3000	1.0000	36.0000	
0.7275								
	10.1541	-0.2366	29.7817	1.0000	-0.1083	8.5924	6.0658	
0.0000								
6 6	70.9120	54.0531	30.0000	0.4931	-0.3000	1.0000	16.0000	
0.0392								
	0.2476	-0.8055	7.1248	1.0000	-0.1009	8.7229	0.0000	
0.0000								
1 7	0.0000	0.0000	0.0000	-0.6528	-0.3000	0.0000	36.0000	
0.5000								
	10.0663	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000	
0.0000								
2 7	92.8579	0.0000	0.0000	-0.6528	-0.3000	0.0000	36.0000	
0.1551								
	10.0663	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.0842	7.1758	0.0000	
0.0000								
3 7	228.4876	0.0000	0.0000	-0.8524	-0.3000	0.0000	36.0000	

0.1252								
		0.4016	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.1750	5.2102	0.0000
0.0000								
6	7	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.3000	0.0000	26.0000
1.0000								
		0.5000	0.0000	12.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	0.0000
0.0000								
7	7	34.0777	0.0000	0.0000	0.4832	-0.3000	0.0000	16.0000
0.5154								
		6.4631	-0.4197	14.3085	1.0000	-0.1463	6.1608	0.0000
0.0000								
16		! Nr of off-diagonal terms; Ediss;Ro;gamma;rsigma;rpi;rpi2						
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	
1	3	0.1156	1.8520	9.8317	1.2854	1.1352	1.0706	
1	4	0.1358	1.8293	10.0425	1.6096	-1.0000	-1.0000	
2	4	0.0640	1.6974	11.5167	1.3517	-1.0000	-1.0000	
3	4	0.0846	1.4284	10.0808	1.8339	-1.0000	-1.0000	
2	5	0.0568	1.6740	9.6297	1.2200	-1.0000	-1.0000	
3	5	0.1927	2.2551	11.2308	-1.0000	-1.0000	-1.0000	
4	5	0.1500	2.1500	11.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000	
1	6	0.2000	1.9000	12.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000	
2	6	0.2000	1.5207	12.9535	1.2125	-1.0000	-1.0000	
3	6	0.2000	1.9048	10.8374	1.7163	1.2444	-1.0000	
1	7	0.2000	1.9000	12.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000	
2	7	0.0564	1.4937	12.0744	1.7276	-1.0000	-1.0000	
3	7	0.1651	1.8998	11.2212	1.5416	-1.0000	-1.0000	
6	7	0.0216	1.5025	11.8792	-1.0000	-1.0000	-1.0000	
64		! 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	49.6811	7.1713	4.3889	0.0000	0.7171	10.2661
1.0463								
3	1	3	77.7473	40.1718	2.9802	-25.3063	1.6170	-46.1315
2.2503								
2	1	3	65.0000	13.8815	5.0583	0.0000	0.4985	0.0000
1.4900								
1	3	1	73.5312	44.7275	0.7354	0.0000	3.0000	0.0000
1.0684								
1	3	3	79.4761	36.3701	1.8943	0.0000	0.7351	67.6777

3.0000									
3	3	3	80.7324	30.4554	0.9953	0.0000	1.6310	50.0000	
1.0783									
1	3	2	70.1880	20.9562	0.3864	0.0000	0.0050	0.0000	
1.6924									
2	3	3	75.6935	50.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	
1.1680									
2	3	2	85.8000	9.8453	2.2720	0.0000	2.8635	0.0000	
1.5800									
1	2	3	0.0000	25.0000	3.0000	0.0000	1.0000	0.0000	
1.0400									
3	2	3	0.0000	15.0000	2.8900	0.0000	0.0000	0.0000	
2.8774									
2	2	3	0.0000	8.5744	3.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
1.0421									
1	4	1	29.1655	3.3035	0.2000	0.0000	1.1221	0.0000	
1.0562									
1	1	4	59.8697	2.8115	1.9262	0.0000	0.7602	0.0000	
1.4056									
1	4	4	25.4591	15.9430	0.9664	0.0000	2.2242	0.0000	
1.1088									
4	1	4	88.6279	26.0015	1.0328	0.0000	0.2361	0.0000	
2.0576									
2	1	4	47.3695	16.9204	4.1052	0.0000	0.1000	0.0000	
1.0050									
2	4	2	34.1965	6.6782	6.5943	0.0000	1.3895	0.0000	
1.5365									
2	2	4	0.1000	30.0000	3.4094	0.0000	2.4379	0.0000	
1.5166									
4	2	4	0.0000	8.2994	5.7832	0.0000	2.9873	0.0000	
1.7716									
2	4	4	21.2590	6.5954	0.9951	0.0000	2.8006	0.0000	
1.0000									
2	4	4	180.0000	-6.9970	24.3956	0.0000	0.7878	0.0000	
1.3672									
1	3	4	90.0000	12.8684	1.4601	0.0000	0.8757	0.0000	
1.0000									
3	1	4	18.8567	24.3753	3.9647	0.0000	0.1000	0.0000	
1.5314									
3	4	3	79.7335	0.0100	0.1392	0.0000	0.4968	0.0000	
2.1948									
4	3	4	57.6787	4.8566	2.5768	0.0000	0.7552	0.0000	
1.0000									
2	3	4	59.4556	10.2025	0.7481	0.0000	1.4521	0.0000	
1.0000									
3	3	4	73.6721	32.6330	1.7223	0.0000	1.0221	0.0000	
1.4351									
3	4	4	65.7545	5.6268	4.0645	0.0000	1.7794	0.0000	
2.6730									
3	2	4	0.0000	4.6026	2.5343	0.0000	0.7284	0.0000	

1.1051									
2	4	3	34.0653	20.1868	4.7461	0.0000	0.1000	0.0000	
1.6752									
3	2	5	0.0000	0.0100	0.5211	0.0000	0.0000	0.0000	
1.3859									
6	6	6	78.5339	36.4328	1.0067	0.0000	0.1694	0.0000	
1.6608									
2	6	6	77.2616	5.0190	7.8944	0.0000	4.0000	0.0000	
1.0400									
2	6	2	75.7983	14.4132	2.8640	0.0000	4.0000	0.0000	
1.0400									
3	6	6	90.6812	31.1846	4.4543	0.0000	0.5073	0.0000	
2.1809									
2	6	3	73.6998	40.0000	1.8782	0.0000	4.0000	0.0000	
1.1290									
3	6	3	80.1361	36.2368	0.9504	0.0000	0.2624	0.0000	
2.0787									
6	3	6	80.4450	6.0739	1.7731	0.0000	3.2548	0.0000	
1.0422									
2	3	6	86.7611	7.1742	1.4013	0.0000	1.4999	0.0000	
1.0400									
3	3	6	103.4529	26.9589	1.3470	0.0000	1.7728	0.0000	
1.3091									
2	2	6	0.0000	47.1300	6.0000	0.0000	1.6371	0.0000	
1.0400									
6	2	6	0.0000	27.4206	6.0000	0.0000	1.6371	0.0000	
1.0400									
3	2	6	0.0000	5.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	
1.2500									
3	2	7	0.0000	4.2750	1.0250	0.0000	1.3750	0.0000	
1.4750									
2	2	7	0.0000	3.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	
1.2500									
7	2	7	0.0000	20.2391	0.1328	0.0000	2.9860	0.0000	
1.0870									
2	3	7	88.1144	13.2143	1.5068	0.0000	3.0000	0.0000	
1.0100									
3	3	7	34.4326	25.9544	5.1239	0.0000	2.7500	0.0000	
1.7141									
7	3	7	21.6945	20.0000	4.0000	0.0000	0.6619	0.0000	
1.9714									
2	7	2	67.4229	4.5148	5.9702	0.0000	3.0000	0.0000	
2.6879									
2	7	3	41.8108	17.3800	2.6618	0.0000	0.7372	0.0000	
1.0100									
3	7	3	49.1145	11.8902	2.1383	0.0000	3.0000	0.0000	
1.4790									
2	7	7	180.0000	-26.7860	7.3549	0.0000	1.0000	0.0000	
1.0252									
2	7	7	78.2279	37.6504	0.4809	0.0000	1.0000	0.0000	

```

2.9475
 6 3 7 16.5023  0.0100  2.7027  0.0000  1.0000  0.0000
1.0000
 3 6 7 88.2703  0.3954  0.2500  0.0000  0.5000  0.0000
2.1060
 3 7 6 83.8306  0.3712  0.2500  0.0000  0.5000  0.0000
2.1153
32 ! Nr of torsions;at1;at2;at3;at4;;V1;V2;V3;V2(B0);vconj;n.u;n
 1 1 1 1 -0.2500 34.7453  0.0288 -6.3507 -1.6000  0.0000
0.0000
 1 1 1 2 -0.2500 29.2131  0.2945 -4.9581 -2.1802  0.0000
0.0000
 2 1 1 2 -0.2500 31.2081  0.4539 -4.8923 -2.2677  0.0000
0.0000
 1 1 1 3 -0.3495 22.2142 -0.2959 -2.5000 -1.9066  0.0000
0.0000
 2 1 1 3  0.0646 24.3195  0.6259 -3.9603 -1.0000  0.0000
0.0000
 3 1 1 3 -0.5456  5.5756  0.8433 -5.1924 -1.0180  0.0000
0.0000
 1 1 3 1  1.7555 27.9267  0.0072 -2.6533 -1.0000  0.0000
0.0000
 1 1 3 2 -1.4358 36.7830 -1.0000 -8.1821 -1.0000  0.0000
0.0000
 2 1 3 1 -1.3959 34.5053  0.7200 -2.5714 -2.1641  0.0000
0.0000
 2 1 3 2 -2.5000 70.0597  1.0000 -3.5539 -2.9929  0.0000
0.0000
 1 1 3 3  0.6852 11.2819 -0.4784 -2.5000 -2.1085  0.0000
0.0000
 2 1 3 3  0.1933 80.0000  1.0000 -4.0590 -3.0000  0.0000
0.0000
 3 1 3 1 -1.9889 76.4820 -0.1796 -3.8301 -3.0000  0.0000
0.0000
 3 1 3 2  0.2160 72.7707 -0.7087 -4.2100 -3.0000  0.0000
0.0000
 3 1 3 3 -2.5000 71.0772  0.2542 -3.1631 -3.0000  0.0000
0.0000
 1 3 3 1  2.5000 -0.6002  1.0000 -3.4297 -2.8858  0.0000
0.0000
 1 3 3 2 -2.5000 -3.3822  0.7004 -5.4467 -2.9586  0.0000
0.0000
 2 3 3 2  2.5000 -4.0000  0.9000 -2.5000 -1.0000  0.0000
0.0000
 1 3 3 3  1.2329 -4.0000  1.0000 -2.5000 -1.7479  0.0000
0.0000
 2 3 3 3  0.8302 -4.0000 -0.7763 -2.5000 -1.0000  0.0000
0.0000
 3 3 3 3 -2.5000 -4.0000  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									
1	1	3	3	-2.0000	73.0530	1.5000	-9.0000	-2.0000	0.0000
0.0000									
1	3	3	1	0.0002	80.0000	-1.5000	-2.5000	-2.0000	0.0000
0.0000									
3	1	3	3	-1.8835	20.0000	1.5000	-9.0000	-2.0000	0.0000
0.0000									
2	6	6	2	0.0000	0.0000	0.0640	-2.4426	0.0000	0.0000
0.0000									
2	6	6	6	0.0000	0.0000	0.1587	-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									
1	! Nr of hydrogen bonds;at1;at2;at3;Rhb;Dehb;vhb1								
3	2	3	2.1200	-3.5800	1.4500	19.5000			