

Reactive MD-force field with Ca and Mg charges fixed to 2 and 1.28 respectively -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
```

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
1.0000	H	0.8930	1.0000	1.0080	1.3550	0.0930	0.8203
1.0000		8.2230	33.2894	1.0000	0.0000	121.1250	3.7248
0.0000		-0.1000	0.0000	61.6606	3.0408	2.4197	0.0003
0.0000		-19.4571	4.2733	1.0338	1.0000	2.8793	0.0000
6.0000	0	1.2450	2.0000	15.9990	2.3890	0.1000	1.0898
2.0000		9.7300	13.8449	4.0000	37.5000	116.0768	8.5000
0.0000		0.9049	0.4056	59.0626	3.5027	0.7640	0.0021
0.0000		-3.5500	2.9000	1.0493	4.0000	2.9225	0.0000
3.0000	Fe	1.9506	3.0000	55.8450	2.0308	0.1274	0.7264
0.0000		11.0534	2.2637	3.0000	0.0000	18.3725	1.2457
0.0000		-1.2000	0.0000	66.4838	30.0000	1.0000	0.0000
0.0000		-16.2040	2.7917	1.0338	6.0000	2.5791	0.0000
7.0000	Cl	1.7140	1.0000	35.4500	1.9139	0.2000	0.3837
0.0000		11.5345	10.1330	1.0000	0.0000	0.0000	9.9614
0.0000		-1.0000	3.5750	143.1770	6.2293	5.2294	0.1542
0.0000		-10.2080	2.9867	1.0338	6.2998	2.5791	0.0000
4.0000	Si	2.1932	4.0000	28.0600	1.8951	0.1737	0.8112
0.0000		11.3429	5.2054	4.0000	21.7115	139.9309	4.0081
0.0000		-1.0000	0.0000	128.2031	9.0751	23.8188	0.8381
0.0000		-4.1684	2.0754	1.0338	4.0000	2.5791	0.0000
3.0000	Al	2.1967	3.0000	26.9820	2.3738	0.2328	0.4558
0.0000		9.4002	3.9009	3.0000	0.0076	16.5151	1.6032
0.0000		-1.0000	0.0000	78.4675	20.0000	0.2500	0.0000

0.0000		0.1000	1.0000	0.0000	1.0000	-0.1216	4.5062	0.0000
0.0494	3 4	65.7713	0.0000	0.0000	0.1366	-0.3000	1.0000	36.0000
0.0000		0.9495	-0.3500	15.0000	1.0000	-0.0555	7.9897	1.0000
0.2749	4 4	38.7471	0.0000	0.0000	0.3595	-0.2000	0.0000	16.0000
0.0000		1.0000	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.0771	6.4477	0.0000
1.2500	2 5	109.1686	0.0000	0.0000	-0.1657	-0.2000	0.0000	16.0000
0.0000		2.8463	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1111	5.2687	0.0000
0.5000	3 5	0.0000	0.0000	0.0000	0.5000	-0.2000	0.0000	16.0000
0.0000		1.0001	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000
0.5000	4 5	0.0000	0.0000	0.0000	0.2500	-0.2000	0.0000	16.0000
0.0000		0.5000	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	0.0000
0.3356	5 5	0.2500	0.0000	0.0000	0.1803	-0.2000	0.0000	16.0000
0.0000		0.9228	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1178	5.6715	0.0000
0.5000	1 6	0.0000	0.0000	0.0000	-0.6528	-0.3000	0.0000	36.0000
0.0000		10.0663	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000
0.1186	2 6	250.0000	0.0000	0.0000	-0.7128	0.0000	1.0000	6.0000
0.0000		18.5790	1.0000	0.0000	1.0000	-0.0731	7.4983	0.0000
0.7275	3 6	261.9074	5.9533	0.0000	-0.6223	-0.3000	1.0000	36.0000
0.0000		10.1541	-0.2366	29.7817	1.0000	-0.1083	8.5924	6.0658
0.0392	6 6	70.9120	54.0531	30.0000	0.4931	-0.3000	1.0000	16.0000
0.0000		0.2476	-0.8055	7.1248	1.0000	-0.1009	8.7229	0.0000
0.5000	1 7	0.0000	0.0000	0.0000	-0.6528	-0.3000	0.0000	36.0000
0.0000		10.0663	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000
0.1551	2 7	92.8579	0.0000	0.0000	-0.6528	-0.3000	0.0000	36.0000
0.0000		10.0663	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.0842	7.1758	0.0000

2.9475	2	7	7	78.2279	37.6504	0.4809	0.0000	1.0000	0.0000	
1.0000	6	3	7	16.5023	0.0100	2.7027	0.0000	1.0000	0.0000	
2.1060	3	6	7	88.2703	0.3954	0.2500	0.0000	0.5000	0.0000	
2.1153	3	7	6	83.8306	0.3712	0.2500	0.0000	0.5000	0.0000	
32	! Nr of torsions;at1;at2;at3;at4;;V1;V2;V3;V2(B0);vconj;n.u;n									
0.0000	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
	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		