

Supporting Information

Understanding Physical Chemistry of $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ using ReaxFF Molecular Dynamics

Simulations

Dooman Akbarian¹, Nadire Nayir^{1,2,3} and Adri C. T. van Duin^{1,2}*

¹ Department of Mechanical Engineering, Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania 16802, United States.

² 2-Dimensional Crystal Consortium (2DCC) Materials Research Institute, The Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania 16802, United States.

³ Department of Physics, Karamanoglu Mehmetbey University, Karaman 70000, Turkey.

ReaxFF Optimization Method

In ReaxFF, a successive one-parameter search algorithm was employed to minimize the sum-of-squares error function (Equation S1)¹. The orders of fitted parameters are as follows. Atom, bond, off-diagonal, valence angle, and torsion angle, respectively.

$$Error = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\chi_{i,QM} - \chi_{i,ReaxFF}}{\sigma_i} \right]^2 \quad (S1)$$

where $\chi_{i,QM}$ is a *QM* value, $\chi_{i,ReaxFF}$ is a ReaxFF value, and σ_i is a weight assigned to data point i . A total of 37 parameters were fitted to a training set using a successive single-parameter search technique, using multiple cycles to account for parameter correlation.

Force Field developed in this study

Reactive MD-force field: BaTiO₃/SrTiO Aug 2021

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 !vdWaals 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
 14 ! 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 202.2908 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 0.7921 1.1748 5.0000
 10.0667 7.8431 4.0000 32.2482 100.0000 7.5795 6.3952 2.0000
 1.0433 27.4290 119.9837 1.9457 4.2874 3.4869 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 5.7824 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 127.9160 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 14.9482 5.0000 0.0000 0.0000 1.6676 7.0946 0.0000
 -1.0000 25.0000 125.6300 0.2187 21.4305 15.1425 0.0000 0.0000
 -3.9294 3.4831 1.0338 5.0000 2.8793 0.0000 0.0000 0.0000

Na	1.8000	1.0000	22.9898	2.8270	0.1872	0.4000	-1.0000	1.0000	
	10.0000	2.5000	1.0000	0.0000	0.0000	-0.9871	6.7728	0.0000	
	-1.0000	0.0000	23.0445	100.0000	1.0000	0.0000	0.8563	0.0000	
	-2.5000	3.9900	1.0338	8.0000	2.5791	0.0000	0.0000	0.0000	
Ti	2.0254	4.0000	47.8800	2.2105	0.1574	0.5448	0.1000	4.0000	
	12.7041	16.6482	4.0000	0.1000	0.0000	-1.8355	6.8739	0.0000	
	-1.0000	0.0000	143.1770	27.6505	-0.0753	0.0064	0.8563	0.0000	
	-15.0000	3.8359	1.0338	12.0000	2.2632	0.0000	0.0000	0.0000	
Cl	1.7140	1.0000	35.4500	1.9139	0.2000	0.3500	-1.0000	7.0000	
	11.5345	10.1330	1.0000	0.0000	0.0000	9.9704	6.1703	0.0000	
	-1.0000	1.2769	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	
F	1.2100	1.0000	18.9984	1.8601	0.1200	0.3000	-0.1000	7.0000	
	11.5000	7.5000	4.0000	9.2533	0.2000	9.0000	15.0000	0.0000	
	-1.0000	35.0000	1.5000	6.9821	4.1799	1.0561	0.0000	0.0000	
	-7.3000	2.6656	1.0493	4.0000	2.9225	0.0000	0.0000	0.0000	
Ba	2.5456	2.0000	137.3270	2.7000	0.2962	0.4492	-1.0000	2.0000	
	10.3042	47.4978	2.0000	-5.0000	0.0000	-4.4485	5.5000	0.0000	
	-1.0000	0.0000	143.1770	109.4891	9.4011	0.0147	0.8563	0.0000	
	-7.5000	2.9867	1.0338	2.0000	2.5791	0.0000	0.0000	0.0000	
Sr	2.1997	2.0000	87.6200	2.5141	0.3839	0.3983	1.0000	2.0000	
	11.1452	27.5993	3.0000	0.0000	0.0000	-4.2868	6.5000	0.0000	
	-1.3000	0.0000	220.0000	49.9248	0.3370	0.0000	0.0000	0.0000	
	-25.0000	4.0000	1.0564	6.2998	2.9663	1.0000	0.1000	13.0000	
X	-0.1000	2.0000	1.0080	2.0000	0.0000	0.0100	-0.1000	6.0000	
	10.0000	2.5000	4.0000	0.0000	0.0000	8.5000	999.0000	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	
67	! 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 4 185.3171 0.0000 0.0000 -0.3689 0.0000 1.0000 6.0000 0.2854
7.6517 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0408 6.0255 0.0000 0.0000
1 5 128.7959 56.4134 39.0716 0.0688 -0.4463 1.0000 31.1766 0.4530
0.1955 -0.3587 6.2148 1.0000 -0.0770 6.6386 1.0000 0.0000
2 5 136.1049 0.0000 0.0000 -0.4669 0.0000 1.0000 6.0000 0.3803
10.5730 1.0000 0.0000 1.0000 -0.1000 7.0000 1.0000 0.0000
3 5 135.6998 220.0000 40.0000 0.5848 -0.2406 1.0000 22.1005 0.2335
0.7069 -0.2681 8.3465 1.0000 -0.0922 5.4651 1.0000 0.0000
4 5 0.0000 0.0000 0.0000 0.5000 -0.2000 1.0000 40.0000 0.3000
0.4000 -0.2500 9.0000 1.0000 -0.1000 6.0000 1.0000 0.0000
5 5 0.0000 0.0000 0.0000 0.2500 -0.5000 1.0000 20.0000 1.0000
0.2500 -0.2500 10.0000 1.0000 -0.1000 8.0000 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 7 201.0058 194.1410 0.0000 1.0000 -0.5000 1.0000 25.0000 0.4873
0.4358 -0.1571 15.8745 1.0000 -0.2431 6.3823 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
1	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
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	45.8933	0.0000	0.0000	-0.1511	-0.3000	1.0000	36.0000	0.3105
		5.8448	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.0659	7.9140	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
5	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	0.0000	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	0.0000	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	64.4508	0.0000	0.0000	-0.3738	0.3000	0.0000	25.0000	0.2158
		0.9915	-0.4000	12.0000	1.0000	-0.0515	5.0000	0.0000	0.0000
4	6	50.0000	10.0901	0.0000	-1.0000	-0.3000	1.0000	36.0000	0.7058
		0.8567	-0.3487	17.4990	1.0000	-0.0794	8.2232	1.0000	0.0000
1	9	0.0000	0.0000	0.0000	-0.2872	-0.3000	1.0000	36.0000	0.0082
		1.7973	-0.2500	20.0000	1.0000	-0.2578	6.5219	1.0000	0.0000
2	9	0.0000	0.0000	0.0000	-0.2872	-0.3000	1.0000	36.0000	0.0082
		1.7973	-0.2500	20.0000	1.0000	-0.2578	6.5219	1.0000	0.0000
3	9	100.2767	34.7012	0.0000	2.8160	-0.3000	0.0000	36.0000	0.1915
		-0.0406	-0.2709	15.9626	1.0000	-0.1264	7.0520	0.0000	0.0000
4	9	0.0000	0.0000	0.0000	-0.2872	-0.3000	1.0000	36.0000	0.0082
		1.7973	-0.2500	20.0000	1.0000	-0.2578	6.5219	1.0000	0.0000
5	9	0.0000	0.0000	0.0000	-0.2872	-0.3000	1.0000	36.0000	0.0082
		1.7973	-0.2500	20.0000	1.0000	-0.2578	6.5219	1.0000	0.0000
6	9	0.0000	0.0000	0.0000	-0.2872	-0.3000	1.0000	36.0000	0.0082
		1.7973	-0.2500	20.0000	1.0000	-0.2578	6.5219	1.0000	0.0000
7	9	0.0000	0.0000	0.0000	-0.2872	-0.3000	1.0000	36.0000	0.0082
		1.7973	-0.2500	20.0000	1.0000	-0.2578	6.5219	1.0000	0.0000
8	9	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
9	9	80.1930	0.0000	0.0000	-0.8469	-0.2000	0.0000	16.0000	0.2022
		0.7528	-0.1924	14.9725	1.0000	-0.0885	5.0000	0.0000	0.0000

1	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
2	10	98.9788	0.0000	0.0000	-0.0572	-0.2000	0.0000	16.0000	1.1523
		2.2822	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1093	5.1686	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
4	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
5	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
6	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
7	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
8	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	133.8732	0.0000	0.0000	-0.0830	-0.2000	0.0000	16.0000	0.5483
		0.1065	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.0553	8.5063	0.0000	0.0000
10	10	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	11	237.8781	0.0000	0.0000	-0.7438	-0.5000	1.0000	35.0000	1.0460
		3.6661	-0.2500	15.0000	1.0000	-0.0800	5.4719	1.0000	0.0000
2	11	0.0000	0.0000	0.0000	-0.4643	0.0000	1.0000	6.0000	0.6151
		12.3710	1.0000	0.0000	1.0000	-0.1008	8.5980	0.0000	0.0000
3	11	0.0000	0.0000	0.0000	-0.4643	0.0000	1.0000	6.0000	0.6151
		12.3710	1.0000	0.0000	1.0000	-0.1008	8.5980	0.0000	0.0000
4	11	0.0000	0.0000	0.0000	-0.4643	0.0000	1.0000	6.0000	0.6151
		12.3710	1.0000	0.0000	1.0000	-0.1008	8.5980	0.0000	0.0000
5	11	0.0000	0.0000	0.0000	-0.4643	0.0000	1.0000	6.0000	0.6151
		12.3710	1.0000	0.0000	1.0000	-0.1008	8.5980	0.0000	0.0000
11	11	250.0765	0.0000	0.0000	0.2298	-0.3500	1.0000	25.0000	0.8427
		0.1167	-0.2500	15.0000	1.0000	-0.1506	7.3516	1.0000	0.0000
2	12	0.0000	0.0000	0.0000	-0.2500	0.0000	1.0000	6.0000	0.5000
		5.0000	1.0000	0.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000	0.0000
3	12	60.4668	0.0000	0.0000	-0.4572	-0.3000	1.0000	36.0000	0.3444
		3.6756	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.0630	5.0895	1.0000	0.0000
9	12	0.0000	0.0000	0.0000	-0.2500	0.0000	1.0000	6.0000	0.5000
		5.0000	1.0000	0.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000	0.0000

12	12	27.2251	0.0000	0.0000	0.0600	-0.2000	0.0000	16.0000	0.3937
		1.9957	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.0413	5.4657	0.0000	0.0000
2	13	42.0900	0.0000	0.0000	-0.0391	-0.1418	1.0000	13.1260	0.0348
		0.9385	-0.1310	0.0000	1.0000	-0.1997	6.4136	0.0000	24.4461
3	13	40.0000	0.0000	43.3991	1.0000	-0.3000	1.0000	36.0000	1.0000
		0.9111	-0.2500	12.0000	1.0000	-0.0746	8.2827	1.0000	24.4461
13	13	25.4008	0.0000	0.0000	0.2399	-0.2000	0.0000	16.0000	0.4158
		0.5220	-0.2000	10.0000	1.0000	-0.0848	4.0000	0.0000	0.0000
9	13	0.0000	0.0000	0.0000	-0.2500	0.0000	1.0000	6.0000	0.5000
		5.0000	-0.5000	25.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000	0.0000
12	13	0.0000	0.0000	0.0000	-0.2500	0.0000	1.0000	6.0000	0.5000
		5.0000	-0.5000	25.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000	0.0000
30	!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		
2	4	0.0687	1.5130	10.0094	0.9412	-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	0.1962	1.7872	10.2319	1.4622	1.4025	-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	0.0534	1.7520	10.4281	1.8000	1.4498	-1.0000		
6	7	0.1801	1.8566	9.8498	0.1000	-1.0000	-1.0000		
3	8	0.0825	1.5904	11.3396	1.5905	-1.0000	-1.0000		
2	9	0.1750	1.7939	13.5000	0.0100	-1.0000	-1.0000		
3	9	0.1069	1.7173	10.1157	1.8026	1.6756	-1.0000		
10	9	0.1368	2.2000	12.5000	1.8549	1.4718	-1.0000		
1	9	0.2035	1.7007	11.4530	0.0100	-1.0000	-1.0000		
2	10	0.0376	1.6671	9.6285	1.2123	-1.0000	-1.0000		
3	10	0.1945	2.2766	11.2353	-1.0000	-1.0000	-1.0000		
1	11	0.1071	1.6243	11.0402	1.3176	-1.0000	-1.0000		
2	11	0.0431	1.7204	10.3632	0.5386	-1.0000	-1.0000		
2	12	0.1000	1.7610	10.4809	0.1000	-1.0000	-1.0000		
3	12	0.2567	1.8543	12.9856	1.9854	-1.0000	-1.0000		

9	12	0.2845	2.4303	12.9939	0.1000	-1.0000	-1.0000		
2	13	0.0274	1.6386	13.6906	0.0010	-1.0000	-1.0000		
3	13	0.2232	1.7510	12.1075	1.8479	-1.0000	-1.0000		
9	13	0.3000	2.3514	13.0000	0.1000	-1.0000	-1.0000		
12	13	0.3000	2.3514	13.0000	0.1000	-1.0000	-1.0000		
95	! Nr of angles;at1;at2;at3;Thetao,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	78.5538	21.4381	7.4715	0.0000	1.1046	50.0000	1.5275
3	1	4	73.9544	12.4661	7.0000	0.0000	1.1046	0.0000	1.1880
4	1	4	89.3168	20.2660	7.5000	0.0000	1.1046	0.0000	1.5403
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	81.4699	7.2318	1.2608	0.0000	3.0000	0.0000	1.2127
1	4	3	103.3204	33.0381	0.5787	0.0000	3.0000	0.0000	1.2127
1	4	4	50.0000	25.0250	4.7651	0.0000	3.0000	0.0000	1.2028
3	4	3	74.1978	42.1786	1.7845	-18.0069	3.0000	0.0000	1.2127
3	4	4	74.8600	43.7354	1.1572	-0.9193	3.0000	0.0000	1.2127
4	4	4	75.0538	14.8267	5.2794	0.0000	3.0000	0.0000	1.2127
1	4	2	68.2294	29.6576	1.0533	0.0000	0.3481	0.0000	1.5443
2	4	3	81.3686	40.0712	2.2396	0.0000	0.3481	0.0000	1.5443

2	4	4	83.0104	43.4766	1.5328	0.0000	0.3481	0.0000	1.5443
2	4	2	79.6336	17.7917	3.7832	0.0000	0.0222	0.0000	2.0238
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
3	5	3	81.0926	30.2268	6.4132	-5.4471	2.5968	0.0000	3.0000
1	5	3	70.0000	35.0000	3.4223	0.0000	1.3550	0.0000	1.2002
1	3	5	57.3353	41.0012	1.0609	0.0000	1.3000	0.0000	3.0000
3	3	5	83.9753	31.0715	3.5590	0.0000	0.8161	0.0000	1.1776
2	3	5	89.8843	17.5000	3.3660	0.0000	2.0000	0.0000	2.0734
2	6	2	0.0000	49.8261	0.2093	0.0000	2.0870	0.0000	2.2895
2	2	6	0.0000	40.0366	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	50.0000	23.2193	7.9751	0.0000	1.1095	0.0000	2.9806
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	90.0000	18.4167	0.6799	-8.0000	0.1310	0.0000	2.2321
2	3	7	72.6004	9.6150	0.8905	0.0000	3.5473	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	41.0995	3.2207	7.3523	0.0000	0.1101	0.0000	1.0947
7	3	7	62.1312	7.5931	0.1000	0.0000	0.5154	0.0000	2.1744
1	3	7	74.1394	8.5687	1.7132	0.0000	-0.6553	0.0000	2.2323

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	84.8677	16.3675	3.2283	0.0000	0.0500	0.0000	2.9991	
9	3	9	47.3663	2.3314	1.0467	0.0000	2.0000	0.0000	2.9601	
10	9	10	79.8775	32.7635	1.6551	0.0000	1.0510	0.0000	1.6270	
9	10	9	28.5238	40.0000	5.0000	0.0000	2.0000	0.0000	1.1000	
3	3	9	62.9344	15.0215	4.3743	0.0000	0.6168	0.0000	1.1673	
3	9	9	23.4882	1.3983	8.0000	0.0000	0.0500	0.0000	1.1000	
2	3	9	90.0000	9.7766	8.0000	0.0000	0.0505	0.0000	1.7257	
1	3	9	90.0000	7.6430	0.2869	0.0000	1.8647	0.0000	4.0000	
3	2	10	0.0000	0.0100	0.0100	0.0000	0.0000	0.0000	1.1456	
11	1	11	77.8443	49.0744	5.9913	0.0000	0.7835	0.0000	2.3020	
1	11	1	0.0000	19.9962	3.2299	0.0000	2.1012	0.0000	1.1537	
1	11	11	0.0000	25.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0400	
11	1	2	69.6421	10.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0400	
2	3	12	90.0000	4.4647	1.6312	0.0000	1.0000	0.0000	1.1000	
3	12	3	66.5630	0.5000	4.7184	0.0000	0.2705	0.0000	2.2188	
12	3	12	18.5481	1.8870	5.0000	0.0000	1.3613	0.0000	1.1000	
9	3	12	0.4111	1.8950	6.5533	0.0000	1.0000	0.0000	1.4431	
3	13	3	40.0000	11.4141	4.2832	0.0000	0.0500	0.0000	1.4341	
13	3	13	40.8310	12.4024	5.3546	0.0000	3.9982	0.0000	1.3599	
2	3	13	81.2902	1.9249	5.8682	0.0000	0.8759	0.0000	1.1719	
3	3	13	65.4036	25.0000	2.5106	0.0000	1.5971	0.0000	1.0000	
9	3	13	0.1000	5.0000	8.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.3417	
12	3	13	29.6896	7.1447	5.1773	0.0000	2.6798	0.0000	1.2300	
57	! 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	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	1.2799	20.7787	-0.5249	-2.5000	-1.0000	0.0000	0.0000
2	1	1	3	1.9159	19.8113	0.7914	-4.6995	-1.0000	0.0000	0.0000
3	1	1	3	-1.4477	16.6853	0.6461	-4.9622	-1.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	1	0.4816	19.6316	-0.0057	-2.5000	-1.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	2	1.2044	80.0000	-0.3139	-6.1481	-1.0000	0.0000	0.0000
2	1	3	1	-2.5000	31.0191	0.6165	-2.7733	-2.9807	0.0000	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	1	4	0	1.7932	141.5515	0.9686	-4.2368	-1.9727	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	-3.0000	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	3.3423	30.3435	0.0365	-2.7171	0.0000	0.0000	0.0000
0	5	5	0	-0.0555	-5.0000	0.1515	-2.2056	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	5	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2	3	5	3	2.5000	2.5000	0.2237	-10.0000	-1.0000	0.0000	0.0000
0	3	5	0	-2.5000	50.0000	-0.5000	-10.0000	-1.0000	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	-0.3232	14.3871	0.1823	-9.8682	-1.7255	0.0000	0.0000
7	1	1	7	-0.1452	50.0000	-0.1915	-8.0773	-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	18.9285	0.3649	-6.1208	0.0000	0.0000	0.0000
2	3	7	3	1.5000	-1.0000	0.2575	-6.2100	0.0000	0.0000	0.0000
1	3	7	3	-1.4375	-0.8700	0.9861	-2.5424	0.0000	0.0000	0.0000
7	3	7	3	-1.5000	21.5086	-1.0000	-4.8869	0.0000	0.0000	0.0000
2	1	3	9	0.0000	84.3556	0.1000	-3.1953	0.0000	0.0000	0.0000

1	1	3	9	0.0000	51.0461	0.1059	-7.2043	0.0000	0.0000	0.0000
2	3	9	3	-0.2500	0.0100	-0.5000	-4.6984	0.0000	0.0000	0.0000
1	1	1	11	0.5000	0.1000	0.4683	-11.5274	-1.7255	0.0000	0.0000
2	1	1	11	0.0000	49.3871	0.2000	-10.5765	-1.7255	0.0000	0.0000
11	1	1	11	-0.5000	95.4727	-0.2080	-4.8579	-1.7255	0.0000	0.0000
0	1	11	0	4.0000	45.8264	0.9000	-4.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	11	11	0	4.0000	45.8264	0.8897	-4.0000	0.0000	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		1.6787	-3.9601	1.4500	19.5000			
4	2	3		1.5585	-3.9305	1.4500	19.5000			
4	2	4		1.9336	-5.8831	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			

References

1. van Duin, A. C.; Baas, J. M.; Van De Graaf, B., Delft molecular mechanics: a new approach to hydrocarbon force fields. Inclusion of a geometry-dependent charge calculation. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions* **1994**, *90* (19), 2881-2895.