

## Supporting information

### **In-situ Ti assisted graphitization approach for the preparation of graphite foam with lightweight and high thermal conductivity**

Xing Guo<sup>a,b</sup>, Yaxiong Liu<sup>a,b</sup>, Xiaodong Tian<sup>a</sup>, Zechao Tao<sup>a,b,c</sup>, Xi Yan<sup>a,b\*</sup>, Zhanjun Liu<sup>a,b,c\*</sup>

<sup>a</sup> CAS Key Laboratory of Carbon Materials, Institute of Coal Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Taiyuan, 030001, China

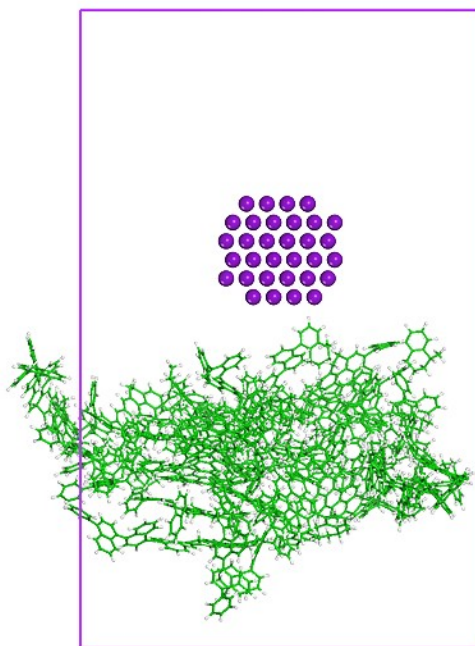
<sup>b</sup> Center of Materials Science and Optoelectronics Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

<sup>c</sup> Dalian National Laboratory for Clean Energy, Dalian 116023, China

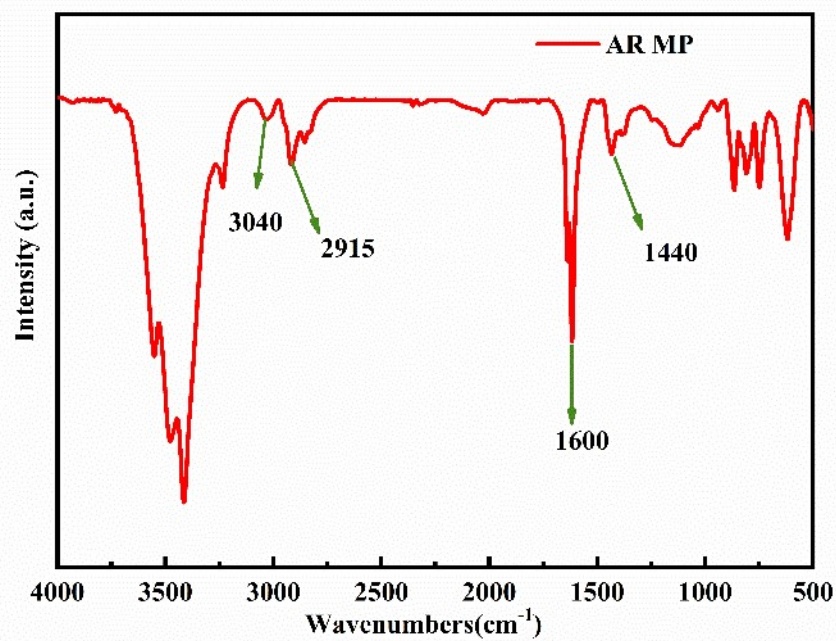
\*Corresponding authors

E-mail addresses: [yanxi@sxicc.ac.cn](mailto:yanxi@sxicc.ac.cn) (Xi Yan)

(Zhanjun Liu)



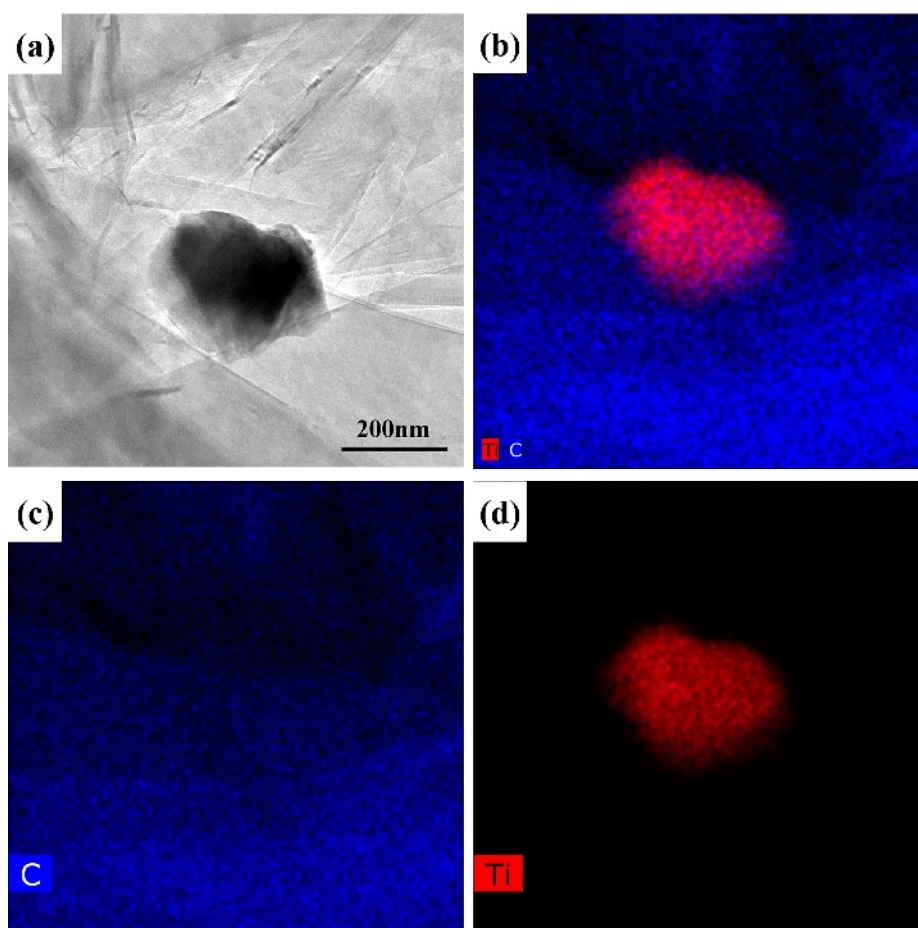
**Fig.S1.** The initial simulation cell of 20 ARMP molecules and 120 Ti atoms. C atoms shown in green, Ti in purple, and H in white.



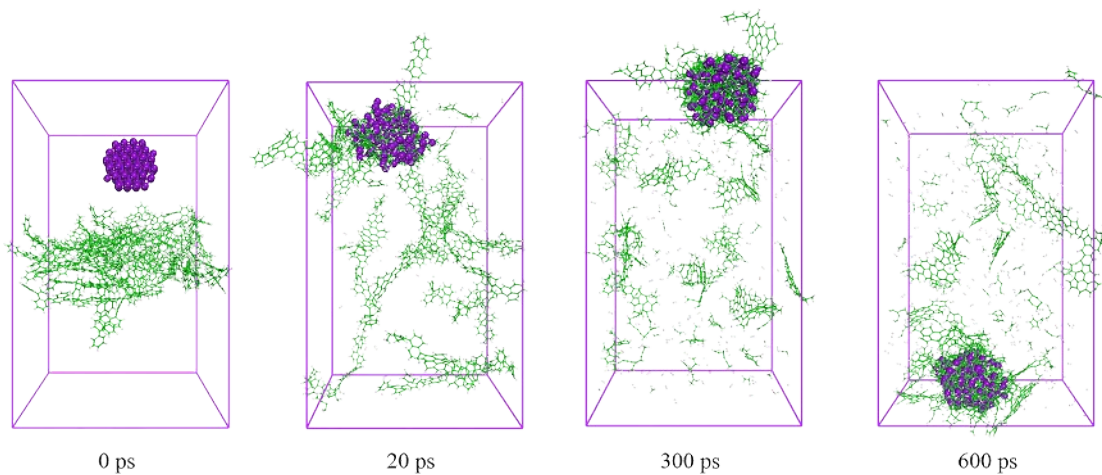
**Fig.S2.** The FTIR spectra of the ARMP.



**Fig.S3.** The images of GF-11 taken from a camera



**Fig.S4.** EDS mapping analysis (a)-(d) of GF-11 from TEM.



**Fig.S5.** Configurations of the model system in 600 ps ReaxFF molecular dynamics simulation.

**Table S1.** Specific heat ( $C_p$ ) of GFs.

<b>Samples</b>	<b><math>C_p</math> (<math>J g^{-1} K^{-1}</math>)</b>
GF-0	0.713
GF-3	0.704
GF-5	0.698
GF-7	0.685
GF-11	0.617
GF-15	0.582

**Table S2.** Properties of mesophase pitch.

<b>Properties</b>	<b>Units</b>	<b>AR MP</b>
Softening point	°C	282
Toluene insoluble content	wt. %	55.0
Pyridine insoluble content	wt. %	51.5
Ash content	wt. %	0.03
Volatile content	wt. %	28.4
Mesophase content	wt. %	100

Reactive MD-force field: Ti/O/H

```
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
-63.5000 !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
  0.0100 !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;vall;n. u. ;val3, vval4

C	1.3674	4.0000	12.0000	2.0453	0.1444	0.8485	1.1706	4.0000
	9.0000	1.5000	4.0000	30.0000	79.5548	4.8446	7.0000	0.0000
	1.1168	0.0000	181.0000	14.2732	24.4406	6.7313	0.8563	0.0000
	-4.1021	5.0000	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	0.0001	1.0000	22.9898	2.6441	0.2588	0.8011	-1.0000	1.0000
	9.0003	2.5000	1.0000	0.0000	0.0000	-3.4731	8.6438	0.0000
	-1.0000	0.0000	23.0445	100.0000	1.0000	0.0000	0.8563	0.0000
	-4.1479	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	0.6311	0.1000	4.0000
	12.7041	16.6482	4.0000	0.1000	0.0000	-1.3647	6.8406	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	0.0014	1.0000	35.4500	2.0560	0.4000	0.3640	-1.0000	7.0000
	9.8895	10.1330	1.0000	0.0000	0.0000	7.8039	9.5196	2.0000
	-1.0000	0.0100	35.1770	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	1.1846	1.0000	18.9984	1.7922	0.1267	0.4038	-0.1000	7.0000
	10.3184	7.5000	1.0000	9.2533	0.2000	9.3891	6.5612	2.0000
	-1.0000	3.5571	18.0000	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
K		0.0001	1.0000	39.0983	2.6480	0.1676	0.3343	-1.0000	1.0000
		9.0047	2.5000	1.0000	0.0000	0.0000	-5.0000	10.4546	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
Li		0.0001	1.0000	6.9410	2.6000	0.0865	0.8380	-0.1000	1.0000
		9.6984	1.4649	1.0000	0.0000	0.0000	-4.0561	9.7698	0.0000
		-1.0000	0.0000	37.5000	5.4409	6.9107	0.1973	0.8563	0.0000
		-24.7916	2.2989	1.0338	1.0000	2.8103	1.3000	0.2000	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	5.0000	9999.999	0.0000
		-0.1000	0.0000	-2.3700	8.7410	13.3640	0.6690	0.9745	0.0000
		-11.0000	2.7466	1.0338	2.0000	2.8793	0.0000	0.0000	0.0000
71	! Nr of bonds; Edis1;LPpen;n. u. ;pbe1;pbo5;l3corr;pbo6								
	pbe2;pbo3;pbo4;Etrip;pbo1;pbo2;ovcorr								
1	1	80.8865	107.9944	52.0636	0.5218	-0.3636	1.0000	34.9876	0.7769
		6.1244	-0.1693	8.0804	1.0000	-0.0586	8.1850	1.0000	0.0000
1	2	180.6309	0.0000	0.0000	-0.4794	0.0000	1.0000	6.0000	0.6281
		12.2202	1.0000	0.0000	1.0000	-0.0670	6.8158	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	163.3110	83.9973	54.4316	-0.5220	-0.3123	1.0000	10.2503	1.0000
		0.3553	-0.3757	7.0000	1.0000	-0.1331	4.6021	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	0.5000	-0.3000	1.0000	16.0000	0.5000
		0.5000	-0.2500	15.0000	1.0000	-0.1000	9.0000	0.0000	0.0000
2	8	26.7569	0.0000	0.0000	1.0000	-0.3000	1.0000	36.0000	0.0100
		0.5785	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.2601	6.6137	1.0000	0.0000
3	8	27.9718	0.0000	0.0000	0.0437	-0.3000	1.0000	36.0000	0.0100
		19.6220	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.1279	7.3318	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	0.0000	0.0000	0.0000	-0.7273	0.3000	0.0000	25.0000	0.1919
		6.6441	-0.4000	12.0000	1.0000	-0.0345	5.0063	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	135.3583	0.0000	0.0000	1.0000	-0.3000	0.0000	36.0000	0.0174
		0.0550	-0.2818	16.1571	1.0000	-0.1093	6.6103	0.0000	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	130.5629	37.6984	0.0000	0.9228	-0.3000	0.0000	36.0000	0.0850
		0.1150	-0.2818	16.1571	1.0000	-0.1343	6.8264	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	213.3489	0.0000	0.0000	-0.5450	-0.5000	1.0000	35.0000	0.7833
		5.4257	-0.2500	15.0000	1.0000	-0.0827	5.9023	1.0000	0.0000
2	10	150.6697	0.0000	0.0000	-0.6499	-0.2000	0.0000	16.0000	0.8645
		3.8414	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.2000	6.8063	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	15.0000	0.0000	0.0000
10	10	148.6765	0.0000	0.0000	0.7040	-0.3500	0.0000	25.0000	0.9428
		-0.3546	-0.2500	15.0000	1.0000	-0.1329	7.0417	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	0.0000	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
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	154.6080	0.0000	0.0000	-0.1948	-0.2000	0.0000	16.0000	0.1676
		16.3699	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.2265	7.1308	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	109.0438	0.0000	0.0000	0.6382	-0.3500	1.0000	25.0000	1.1695
		0.1254	-0.2500	15.0000	1.0000	-0.1062	5.9666	1.0000	0.0000
9	11	194.0978	0.0000	0.0000	-0.9855	-0.2000	0.0000	16.0000	0.4118

		1.0000	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.0715	6.0975	0.0000	0.0000
1	12	0.0000	0.0000	0.0000	0.5000	-0.3000	1.0000	16.0000	0.5000
		0.5000	-0.2500	15.0000	1.0000	-0.1000	9.0000	0.0000	0.0000
2	12	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	12	22.6146	0.0000	43.0000	0.6651	-0.3000	1.0000	36.0000	1.0000
		0.9166	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.0583	7.3861	1.0000	0.0000
10	12	18.4962	0.0000	0.0000	-0.3256	-0.2000	0.0000	16.0000	0.0900
		2.4852	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.0723	6.3893	0.0000	0.0000
12	12	0.0000	0.0000	0.0000	0.3272	0.3000	0.0000	25.0000	0.5944
		0.9915	-0.4000	12.0000	1.0000	-0.0517	4.5075	0.0000	0.0000
9	12	0.0000	0.0000	0.0000	0.5000	-0.3000	0.0000	16.0000	0.5000
		0.5000	-0.2500	15.0000	1.0000	-0.1000	9.0000	0.0000	0.0000
2	13	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	-0.3000	1.0000	36.0000	0.0100
		0.3415	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.2770	6.4396	1.0000	0.0000
3	13	71.3512	-0.0200	0.0000	0.6715	0.3000	0.0000	6.0000	0.1621
		0.1284	-0.2500	11.9965	1.0000	-0.1026	5.8179	0.0000	0.0000
10	13	39.6304	0.0000	0.0000	-0.6878	-0.3000	1.0000	16.0000	0.4891
		1.8957	-0.2500	15.0000	1.0000	-0.0471	5.0000	0.0000	0.0000
13	13	0.0000	0.0000	0.0000	0.3228	0.3000	0.0000	26.0000	0.6003
		1.7161	0.0000	12.0000	1.0000	-0.1015	4.0000	0.0000	0.0000
1	13	0.0000	0.0000	0.0000	0.3228	0.3000	0.0000	26.0000	0.6003
		1.7161	0.0000	12.0000	1.0000	-0.1015	4.0000	0.0000	0.0000
9	13	0.0000	0.0000	0.0000	0.3228	0.3000	0.0000	26.0000	0.6003
		1.7161	0.0000	12.0000	1.0000	-0.1015	4.0000	0.0000	0.0000
37	! Nr of off-diagonal terms; Ediss;Ro;gamma;rsigma;rpi;rpi2								
1	2	0.1200	1.3861	9.8561	1.1254	-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	0.1347	1.8343	9.7934	1.3139	1.1498	1.1039		
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		
1	8	0.2000	1.8500	11.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000		
2	8	0.1100	1.8410	9.1430	1.7735	-1.0000	-1.0000		
3	8	0.1536	1.6000	12.9050	1.6436	-1.0000	-1.0000		
2	9	0.1750	1.7939	13.5000	1.1000	-1.0000	-1.0000		

3	9	0.1200	1.8000	10.5000	1.6526	1.4718	-1.0000		
10	9	0.1368	2.2000	12.5000	1.8549	1.4718	-1.0000		
1	9	0.2497	1.9709	11.2424	1.6312	-1.0000	-1.0000		
1	10	0.1388	1.7970	11.9405	1.5598	-1.0000	-1.0000		
2	10	0.1695	1.6156	9.7834	1.4740	-1.0000	-1.0000		
3	10	0.1491	2.3500	10.1159	-1.0000	-1.0000	-1.0000		
1	11	0.1046	1.6238	11.0397	1.5000	-1.0000	-1.0000		
2	11	0.0553	1.7443	9.0006	1.3514	-1.0000	-1.0000		
9	11	0.1049	1.6192	12.4193	1.7484	1.4718	-1.0000		
1	12	0.2000	1.8500	11.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000		
2	12	0.3000	1.5647	13.3924	-1.0000	-1.0000	-1.0000		
3	12	0.1832	1.7503	12.6152	1.6986	-1.0000	-1.0000		
10	12	0.2428	2.0950	11.0672	2.0182	-1.0000	-1.0000		
9	12	0.2000	1.8500	11.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000		
2	13	0.5000	1.4607	13.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000		
3	13	0.0696	1.8520	10.0874	1.5559	-1.0000	1.0000		
10	13	0.2331	1.6173	12.1979	1.7675	-1.0000	-1.0000		
9	13	0.0200	1.8000	9.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000		
8	9	0.4404	1.8207	12.5000	0.0100	-1.0000	-1.0000		
114		! Nr of angles;at1;at2;at3;Theta,o;ka;kb;pv1;pv2							
1	1	1	74.9085	44.7514	0.9144	0.0000	0.0050	0.3556	2.5715
1	1	2	68.0294	13.4722	5.5819	0.0000	0.6849	0.0000	1.0031
2	1	2	68.4575	22.1235	1.2937	0.0000	3.0000	0.0000	1.5009
1	2	2	0.0000	0.0000	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
1	2	1	0.0000	7.5000	5.0000	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	15.7798	9.0805	4.0304	0.0000	1.8785	70.0000	1.1737
2	1	3	65.0000	13.4505	1.8249	0.0000	1.5646	0.0000	1.2173
3	1	3	74.7266	45.0000	1.8020	-16.7178	2.6091	0.1000	2.3556
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	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	76.7840	44.2266	0.9343	0.0000	1.3483	0.0000	1.8301
1	3	3	63.9120	17.1680	0.8751	0.0000	0.0693	50.9415	3.0000
1	3	2	79.6413	28.6488	0.3789	0.0000	1.6776	0.0000	1.0010
2	3	2	85.8000	9.8453	2.2720	0.0000	2.8635	0.0000	1.5800
2	3	3	79.5453	45.0000	2.1630	0.0000	3.0000	0.0000	1.2391
3	3	3	80.7324	30.4554	0.9953	0.0000	1.6310	50.0000	1.0783
1	3	4	82.4890	31.4554	0.9953	0.0000	3.0000	0.0000	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
2	3	4	75.6201	18.7919	0.9833	0.0000	0.1000	0.0000	1.0500

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	45.0000	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	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	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	90.0000	30.4624	2.1468	0.0000	0.0500	0.0000	1.9485
9	3	9	90.0000	5.7486	5.0000	0.0000	2.0000	0.0000	1.1000
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	33.7127	8.0623	3.4580	0.0000	0.0500	0.0000	2.6065
2	3	9	90.0000	9.7766	8.0000	0.0000	0.0505	0.0000	1.7257
1	3	9	47.6602	40.0000	9.9975	0.0000	1.6770	0.0000	1.5620
3	2	10	0.0000	0.5102	0.0100	0.0000	0.0000	0.0000	1.3399
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
1	9	1	79.0416	34.7981	2.4601	0.0000	4.4940	0.0000	4.0000
9	1	9	92.0437	39.9848	3.5810	0.0000	1.0016	0.0000	2.6458
1	9	3	8.4565	0.8893	1.9621	0.0000	2.1384	0.0000	3.6547
1	1	9	95.0000	35.4300	7.4753	0.0000	0.7434	0.0000	2.9506
1	9	11	67.4762	38.2782	4.9408	0.0000	0.1500	0.0000	1.8376
11	9	11	86.3838	39.7254	1.7723	0.0000	0.0500	0.0000	4.0000
9	11	9	20.0000	40.0000	5.0000	0.0000	0.6953	0.0000	1.5743
1	11	9	20.7615	38.6996	2.8535	0.0000	1.5402	0.0000	1.3906
3	9	11	120.0000	40.0000	1.1631	0.0000	2.0000	0.0000	1.1000
2	3	12	100.0000	1.0007	9.7740	0.0000	1.4276	0.0000	1.0000
12	3	12	98.5744	2.1499	1.6268	0.0000	3.7347	0.0000	2.8271
3	13	3	1.0000	6.7901	5.5000	0.0000	0.2366	0.0000	1.5936
2	3	13	100.0000	4.9629	8.0000	0.0000	0.1000	0.0000	1.0000
13	3	13	100.0000	8.0985	3.1295	0.0000	2.0000	0.0000	1.1755
3	13	10	54.0553	22.2701	8.0000	0.0000	2.3740	0.0000	2.0553
2	10	13	92.8098	7.7675	0.2250	0.0000	0.5870	0.0000	3.0000
9	3	13	76.5056	10.3180	0.9990	0.0000	0.7995	0.0000	1.0000
3	8	3	100.0000	40.0000	7.8728	0.0000	3.2930	0.0000	2.6836
2	3	8	82.0800	5.5605	8.0000	0.0000	1.4276	0.0000	1.6766
8	3	8	81.0000	4.7500	0.9000	0.0000	1.0000	0.0000	2.0000
8	3	9	81.3907	15.0000	3.0000	0.0000	1.5000	0.0000	1.8332
3	1	9	39.4706	40.0000	9.9991	0.0000	5.0000	0.0000	1.6832
9	11	11	90.0000	30.0000	5.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.1000
10	2	10	0.0000	5.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
10	10	10	0.0000	25.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
10	1	10	72.0864	22.4151	6.6934	0.0000	0.7328	0.0000	1.1557
1	10	1	0.0000	40.0000	4.8556	0.0000	2.5647	0.0000	1.4228

1	10	10	0.0000	25.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0400		
2	1	10	74.6486	33.8387	7.4888	0.0000	2.7096	0.0000	1.0000		
60	! Nr of torsions;at1;at2;at3;at4;;V1;V2;V3;V2(BO);vconj;n.u;n										
1	1	1	1	2.1207	26.8713	0.5160	-9.0000	-2.8394	0.0000	0.0000	
1	1	1	2	1.4658	44.1251	0.4411	-5.3120	-2.1894	0.0000	0.0000	
2	1	1	2	1.4787	40.5128	0.4396	-5.2756	-3.0000	0.0000	0.0000	
1	1	1	3	0.9963	17.2365	0.1491	-2.5000	-1.0000	0.0000	0.0000	
2	1	1	3	1.5159	28.6602	0.7169	-7.5489	-3.0000	0.0000	0.0000	
3	1	1	3	-0.2000	23.6540	-1.0000	-5.9155	-1.1552	0.0000	0.0000	
1	1	3	1	1.8231	46.5696	-1.0000	-3.0536	-3.0000	0.0000	0.0000	
1	1	3	2	1.4836	80.0000	0.0363	-4.7349	-1.0000	0.0000	0.0000	
2	1	3	1	0.5983	49.5033	0.7210	-3.4046	-1.6880	0.0000	0.0000	
2	1	3	2	-0.2000	76.3511	1.0000	-4.0709	-1.0000	0.0000	0.0000	
1	1	3	3	-0.2000	5.0000	-1.0000	-3.6523	-2.9000	0.0000	0.0000	
2	1	3	3	2.5000	80.0000	1.0000	-2.6071	-3.0000	0.0000	0.0000	
3	1	3	1	-0.2000	80.0000	-1.0000	-3.6863	-3.0000	0.0000	0.0000	
3	1	3	2	2.5000	38.8954	-0.8368	-4.6681	-2.9000	0.0000	0.0000	
3	1	3	3	-0.2000	78.1766	0.0250	-2.8895	-3.0000	0.0000	0.0000	
1	3	3	1	2.5000	0.1000	1.0000	-2.6905	-2.7573	0.0000	0.0000	
1	3	3	2	0.5241	69.2788	-1.0000	-4.4539	-2.8081	0.0000	0.0000	
2	3	3	2	2.5000	0.1000	-0.4869	-2.8372	-1.0000	0.0000	0.0000	
1	3	3	3	2.5000	0.1000	1.0000	-3.4298	-1.0000	0.0000	0.0000	
2	3	3	3	-0.2000	0.1000	-1.0000	-3.5698	-1.0000	0.0000	0.0000	
3	3	3	3	-0.2000	0.1000	1.0000	-3.8409	-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	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
2	3	13	3	0.0918	64.5743	-1.0000	-4.4228	0.0000	0.0000	0.0000
1	1	1	1	0.0000	5.0000	-0.2000	-7.2626	-2.0000	0.0000	0.0000
2	1	1	1	0.0000	46.5404	-0.0659	-8.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
1	1	1	1	0.0000	56.0716	0.1000	-4.5000	-2.0000	0.0000	0.0000
0	1	1	0	0.0000	45.8264	0.3000	-4.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	1	1	0	0.0000	1.0000	0.1000	-4.0000	0.0000	0.0000	0.0000
13	! 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			
3	2	11		1.5033	-0.0100	1.4500	19.5000			
11	2	3		1.7547	-0.2589	1.4500	19.5000			
3	2	10		1.8833	-3.6250	1.4500	19.5000			
10	2	3		1.8487	-0.0100	1.4500	19.5000			