

## Supplementary Information

### Formation mechanism of metal cluster fullerenes $\text{Sc}_3\text{N}@C_n$ : force field development and molecular dynamics simulation

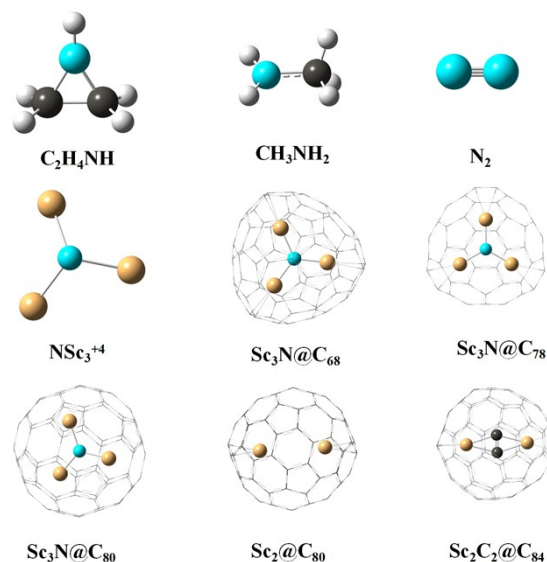


Fig. S1 The structures of training set

Table S1 The structural parameters of  $\text{Sc}_3\text{N}@C_{80}$  from CNSc.ff and density functional theory (DFT) at B3LYP/6-31G level

	Bond			Angle			
	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	
C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1.433	1.438	0.35%	C <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>3</sub>	120.6	120.8	0.17%
C <sub>1</sub> -C <sub>3</sub>	1.436	1.440	0.28%	C <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	117.7	117.7	0.0%
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	1.433	1.429	0.28%	C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	121.2	120.9	0.25%
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.436	1.441	0.35%	C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub>	121.1	121.5	0.33%
C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub>	1.426	1.423	0.21%	C <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>7</sub>	108.2	108.5	0.28%
C <sub>1</sub> -C <sub>7</sub>	1.446	1.453	0.48%	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>8</sub>	107.9	108.3	0.37%
C <sub>2</sub> -C <sub>8</sub>	1.437	1.441	0.28%	C <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>9</sub>	116.7	116.9	0.17%
C <sub>3</sub> -C <sub>9</sub>	1.430	1.426	0.28%	C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>10</sub>	121.3	120.7	0.50%
C <sub>4</sub> -C <sub>10</sub>	1.439	1.444	0.35%	C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>11</sub>	108.8	108.1	0.65%
C <sub>5</sub> -C <sub>11</sub>	1.446	1.451	0.34%	C <sub>2</sub> -C <sub>8</sub> -C <sub>12</sub>	108.5	108.6	0.09%
C <sub>8</sub> -C <sub>12</sub>	1.445	1.451	0.41%	C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> -C <sub>13</sub>	117.2	117.9	0.59%
C <sub>6</sub> -C <sub>13</sub>	1.432	1.436	0.28%	C <sub>4</sub> -C <sub>10</sub> -C <sub>14</sub>	107.8	108.1	0.28%
C <sub>10</sub> -C <sub>14</sub>	1.432	1.439	0.49%	C <sub>1</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>15</sub>	120.4	119.8	0.50%
C <sub>7</sub> -C <sub>15</sub>	1.448	1.450	0.14%	C <sub>7</sub> -C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub>	116.8	116.7	0.09%
C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub>	1.436	1.437	0.07%	C <sub>3</sub> -C <sub>9</sub> -C <sub>17</sub>	121.2	121.2	0.00%
C <sub>9</sub> -C <sub>17</sub>	1.434	1.439	0.35%	C <sub>2</sub> -C <sub>8</sub> -C <sub>18</sub>	120.5	121.0	0.41%
C <sub>8</sub> -C <sub>18</sub>	1.432	1.436	0.28%	C <sub>9</sub> -C <sub>17</sub> -C <sub>19</sub>	121.5	120.9	0.50%
C <sub>17</sub> -C <sub>19</sub>	1.434	1.433	0.07%	C <sub>8</sub> -C <sub>18</sub> -C <sub>20</sub>	117.4	116.9	0.43%

C <sub>18</sub> -C <sub>20</sub>	1.430	1.432	0.14%	C <sub>6</sub> -C <sub>13</sub> -C <sub>21</sub>	122.4	122.4	0.00%
C <sub>13</sub> -C <sub>21</sub>	1.449	1.451	0.14%	C <sub>5</sub> -C <sub>11</sub> -C <sub>22</sub>	122.0	122.4	0.38%
C <sub>11</sub> -C <sub>22</sub>	1.436	1.437	0.07%	C <sub>8</sub> -C <sub>12</sub> -C <sub>23</sub>	120.4	119.7	0.53%
C <sub>12</sub> -C <sub>23</sub>	1.449	1.452	0.21%	C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub> -C <sub>24</sub>	122.0	122.4	0.33%
C <sub>16</sub> -C <sub>24</sub>	1.446	1.451	0.34%	C <sub>16</sub> -C <sub>24</sub> -C <sub>25</sub>	108.8	108.1	0.65%
C <sub>24</sub> -C <sub>25</sub>	1.440	1.441	0.07%	C <sub>7</sub> -C <sub>15</sub> -C <sub>26</sub>	116.5	116.3	0.17%
C <sub>15</sub> -C <sub>26</sub>	1.445	1.452	0.48%	C <sub>10</sub> -C <sub>14</sub> -C <sub>27</sub>	121.2	121.2	0.00%
C <sub>14</sub> -C <sub>27</sub>	1.430	1.426	0.28%	C <sub>18</sub> -C <sub>20</sub> -C <sub>28</sub>	121.9	121.2	0.58%
C <sub>20</sub> -C <sub>28</sub>	1.433	1.438	0.35%	C <sub>8</sub> -C <sub>18</sub> -C <sub>29</sub>	117.2	117.9	0.59%
C <sub>18</sub> -C <sub>29</sub>	1.430	1.423	0.49%	C <sub>20</sub> -C <sub>28</sub> -C <sub>30</sub>	108.2	108.5	0.28%
C <sub>28</sub> -C <sub>30</sub>	1.446	1.453	0.48%	C <sub>17</sub> -C <sub>19</sub> -C <sub>31</sub>	117.2	117.7	0.42%
C <sub>19</sub> -C <sub>31</sub>	1.434	1.433	0.07%	C <sub>12</sub> -C <sub>23</sub> -C <sub>32</sub>	116.5	116.3	0.17%
C <sub>23</sub> -C <sub>32</sub>	1.444	1.450	0.41%	C <sub>11</sub> -C <sub>22</sub> -C <sub>33</sub>	116.9	116.7	0.17%
C <sub>22</sub> -C <sub>33</sub>	1.443	1.450	0.48%	C <sub>12</sub> -C <sub>23</sub> -C <sub>34</sub>	117.2	117.1	0.09%
C <sub>23</sub> -C <sub>34</sub>	1.436	1.437	0.07%	C <sub>14</sub> -C <sub>27</sub> -C <sub>35</sub>	117.4	118.1	0.59%
C <sub>27</sub> -C <sub>35</sub>	1.431	1.429	0.14%	C <sub>14</sub> -C <sub>27</sub> -C <sub>36</sub>	116.7	116.9	0.17%
C <sub>27</sub> -C <sub>36</sub>	1.433	1.440	0.49%	C <sub>15</sub> -C <sub>26</sub> -C <sub>37</sub>	120.4	119.7	0.58%
C <sub>26</sub> -C <sub>37</sub>	1.445	1.451	0.41%	C <sub>16</sub> -C <sub>24</sub> -C <sub>38</sub>	120.7	120.3	0.33%
C <sub>24</sub> -C <sub>38</sub>	1.429	1.423	0.42%	C <sub>24</sub> -C <sub>25</sub> -C <sub>39</sub>	121.2	120.9	0.25%
C <sub>25</sub> -C <sub>39</sub>	1.433	1.429	0.28%	C <sub>25</sub> -C <sub>39</sub> -C <sub>40</sub>	117.5	118.1	0.51%
C <sub>39</sub> -C <sub>40</sub>	1.430	1.426	0.28%	C <sub>18</sub> -C <sub>29</sub> -C <sub>41</sub>	121.1	121.5	0.33%
C <sub>29</sub> -C <sub>41</sub>	1.433	1.441	0.56%	C <sub>29</sub> -C <sub>41</sub> -C <sub>42</sub>	121.3	120.9	0.33%
C <sub>41</sub> -C <sub>42</sub>	1.433	1.429	0.28%	C <sub>28</sub> -C <sub>30</sub> -C <sub>43</sub>	120.4	119.8	0.50%
C <sub>30</sub> -C <sub>43</sub>	1.443	1.450	0.48%	C <sub>30</sub> -C <sub>43</sub> -C <sub>44</sub>	116.5	116.3	0.17%
C <sub>43</sub> -C <sub>44</sub>	1.444	1.452	0.55%	C <sub>23</sub> -C <sub>32</sub> -C <sub>45</sub>	120.4	119.8	0.50%
C <sub>32</sub> -C <sub>45</sub>	1.446	1.453	0.48%	C <sub>23</sub> -C <sub>34</sub> -C <sub>46</sub>	122.4	122.8	0.33%
C <sub>34</sub> -C <sub>46</sub>	1.446	1.452	0.41%	C <sub>27</sub> -C <sub>35</sub> -C <sub>47</sub>	121.2	120.9	0.25%
C <sub>35</sub> -C <sub>47</sub>	1.433	1.441	0.56%	C <sub>32</sub> -C <sub>45</sub> -C <sub>48</sub>	108.2	108.5	0.28%
C <sub>45</sub> -C <sub>48</sub>	1.430	1.438	0.56%	C <sub>27</sub> -C <sub>36</sub> -C <sub>49</sub>	120.5	120.8	0.25%
C <sub>36</sub> -C <sub>49</sub>	1.430	1.438	0.56%	C <sub>34</sub> -C <sub>46</sub> -C <sub>50</sub>	108.8	108.2	0.55%
C <sub>46</sub> -C <sub>50</sub>	1.432	1.439	0.49%	C <sub>24</sub> -C <sub>38</sub> -C <sub>51</sub>	117.4	117.7	0.25%
C <sub>38</sub> -C <sub>51</sub>	1.430	1.432	0.14%	C <sub>35</sub> -C <sub>47</sub> -C <sub>52</sub>	108.8	108.1	0.65%
C <sub>47</sub> -C <sub>52</sub>	1.440	1.451	0.76%	C <sub>38</sub> -C <sub>51</sub> -C <sub>53</sub>	121.9	121.2	0.58%
C <sub>51</sub> -C <sub>53</sub>	1.430	1.438	0.56%	C <sub>34</sub> -C <sub>46</sub> -C <sub>54</sub>	120.8	120.6	0.17%
C <sub>46</sub> -C <sub>54</sub>	1.430	1.426	0.28%	C <sub>36</sub> -C <sub>49</sub> -C <sub>55</sub>	107.9	108.3	0.37%
C <sub>49</sub> -C <sub>55</sub>	1.430	1.441	0.76%	C <sub>41</sub> -C <sub>42</sub> -C <sub>56</sub>	117.5	118.1	0.51%
C <sub>42</sub> -C <sub>56</sub>	1.430	1.426	0.28%	C <sub>30</sub> -C <sub>43</sub> -C <sub>57</sub>	116.9	116.7	0.17%
C <sub>43</sub> -C <sub>57</sub>	1.436	1.437	0.07%	C <sub>35</sub> -C <sub>47</sub> -C <sub>58</sub>	121.1	121.5	0.33%
C <sub>47</sub> -C <sub>58</sub>	1.430	1.423	0.49%	C <sub>45</sub> -C <sub>48</sub> -C <sub>59</sub>	121.9	121.2	0.58%
C <sub>48</sub> -C <sub>59</sub>	1.430	1.432	0.14%	C <sub>48</sub> -C <sub>59</sub> -C <sub>60</sub>	117.4	116.9	0.43%
C <sub>59</sub> -C <sub>60</sub>	1.432	1.436	0.28%	C <sub>51</sub> -C <sub>53</sub> -C <sub>61</sub>	108.2	108.5	0.28%
C <sub>53</sub> -C <sub>61</sub>	1.446	1.453	0.48%	C <sub>46</sub> -C <sub>50</sub> -C <sub>62</sub>	121.5	120.9	0.50%
C <sub>50</sub> -C <sub>62</sub>	1.434	1.433	0.07%	C <sub>47</sub> -C <sub>52</sub> -C <sub>63</sub>	122.0	122.4	0.33%
C <sub>52</sub> -C <sub>63</sub>	1.436	1.437	0.07%	C <sub>50</sub> -C <sub>62</sub> -C <sub>64</sub>	117.2	117.7	0.42%

C <sub>62</sub> -C <sub>64</sub>	1.434	1.433	0.07%	C <sub>43</sub> -C <sub>57</sub> -C <sub>65</sub>	122.0	122.4	0.33%
C <sub>57</sub> -C <sub>65</sub>	1.441	1.451	0.69%	C <sub>57</sub> -C <sub>65</sub> -C <sub>66</sub>	120.7	120.3	0.33%
C <sub>65</sub> -C <sub>66</sub>	1.430	1.423	0.49%	C <sub>46</sub> -C <sub>54</sub> -C <sub>67</sub>	117.5	118.1	0.51%
C <sub>54</sub> -C <sub>67</sub>	1.433	1.429	0.28%	C <sub>59</sub> -C <sub>60</sub> -C <sub>68</sub>	122.3	122.4	0.08%
C <sub>60</sub> -C <sub>68</sub>	1.442	1.451	0.62%	C <sub>47</sub> -C <sub>58</sub> -C <sub>69</sub>	117.2	117.9	0.59%
C <sub>58</sub> -C <sub>69</sub>	1.432	1.436	0.28%	C <sub>48</sub> -C <sub>59</sub> -C <sub>70</sub>	117.4	117.7	0.25%
C <sub>59</sub> -C <sub>70</sub>	1.430	1.423	0.49%	C <sub>50</sub> -C <sub>62</sub> -C <sub>71</sub>	117.2	117.7	0.42%
C <sub>62</sub> -C <sub>71</sub>	1.434	1.433	0.07%	C <sub>57</sub> -C <sub>65</sub> -C <sub>72</sub>	108.8	108.1	0.65%
C <sub>65</sub> -C <sub>72</sub>	1.433	1.441	0.56%	C <sub>58</sub> -C <sub>69</sub> -C <sub>73</sub>	122.3	122.4	0.08%
C <sub>69</sub> -C <sub>73</sub>	1.445	1.451	0.41%	C <sub>65</sub> -C <sub>66</sub> -C <sub>74</sub>	117.4	117.7	0.25%
C <sub>66</sub> -C <sub>74</sub>	1.430	1.432	0.14%	C <sub>60</sub> -C <sub>68</sub> -C <sub>75</sub>	120.4	119.7	0.58%
C <sub>68</sub> -C <sub>75</sub>	1.444	1.452	0.55%	C <sub>68</sub> -C <sub>75</sub> -C <sub>76</sub>	117.3	117.1	0.17%
C <sub>75</sub> -C <sub>76</sub>	1.436	1.437	0.07%	C <sub>62</sub> -C <sub>71</sub> -C <sub>77</sub>	121.5	120.9	0.50%
C <sub>71</sub> -C <sub>77</sub>	1.432	1.439	0.49%	C <sub>71</sub> -C <sub>77</sub> -C <sub>78</sub>	121.2	121.2	0.00%
C <sub>77</sub> -C <sub>78</sub>	1.430	1.426	0.28%	C <sub>68</sub> -C <sub>75</sub> -C <sub>79</sub>	116.5	116.3	0.17%
C <sub>75</sub> -C <sub>79</sub>	1.443	1.450	0.48%	C <sub>66</sub> -C <sub>74</sub> -C <sub>80</sub>	121.9	121.2	0.58%
C <sub>74</sub> -C <sub>80</sub>	1.430	1.438	0.56%	C <sub>47</sub> -C <sub>58</sub> -N <sub>81</sub>	81.3	81.9	0.73%
N <sub>81</sub> -Sc <sub>82</sub>	2.024	2.025	0.05%	C <sub>58</sub> -N <sub>81</sub> -Sc <sub>82</sub>	54.7	54.8	0.18%
N <sub>81</sub> -Sc <sub>83</sub>	2.023	2.025	0.1%	C <sub>58</sub> -N <sub>81</sub> -Sc <sub>83</sub>	69.1	69.2	0.14%
N <sub>81</sub> -Sc <sub>84</sub>	2.024	2.025	0.05%	C <sub>58</sub> -N <sub>81</sub> -Sc <sub>84</sub>	159.0	158.9	0.06%

Table S2 The structural parameters of Sc<sub>2</sub>C<sub>2</sub>@C<sub>84</sub> from CNSc.ff and density functional theory (DFT) at B3LYP/6-31G level

	Bond			Angle			
	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	
C <sub>2</sub> -C <sub>1</sub>	1.452	1.462	0.68%	C <sub>3</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>1</sub>	122.4	122.4	0.00%
C <sub>3</sub> -C <sub>2</sub>	1.415	1.406	0.64%	C <sub>4</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>2</sub>	119.1	119.0	0.08%
C <sub>4</sub> -C <sub>3</sub>	1.470	1.479	0.61%	C <sub>5</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>3</sub>	117.9	117.8	0.08%
C <sub>5</sub> -C <sub>4</sub>	1.443	1.452	0.62%	C <sub>6</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>4</sub>	118.8	118.0	0.68%
C <sub>6</sub> -C <sub>5</sub>	1.445	1.451	0.41%	C <sub>7</sub> -C <sub>6</sub> -C <sub>5</sub>	108.2	108.4	0.18%
C <sub>7</sub> -C <sub>6</sub>	1.423	1.425	0.14%	C <sub>8</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>6</sub>	120.9	121.9	0.82%
C <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	1.427	1.429	0.14%	C <sub>9</sub> -C <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	114.8	115.7	0.78%
C <sub>9</sub> -C <sub>8</sub>	1.418	1.411	0.50%	C <sub>10</sub> -C <sub>9</sub> -C <sub>8</sub>	120.6	120.1	0.42%
C <sub>10</sub> -C <sub>9</sub>	1.428	1.436	0.56%	C <sub>11</sub> -C <sub>10</sub> -C <sub>9</sub>	109.4	109.3	0.09%
C <sub>11</sub> -C <sub>10</sub>	1.439	1.449	0.69%	C <sub>12</sub> -C <sub>11</sub> -C <sub>10</sub>	121.8	121.0	0.66%
C <sub>12</sub> -C <sub>11</sub>	1.422	1.415	0.49%	C <sub>13</sub> -C <sub>12</sub> -C <sub>11</sub>	118.3	118.2	0.08%
C <sub>13</sub> -C <sub>12</sub>	1.462	1.471	0.61%	C <sub>14</sub> -C <sub>13</sub> -C <sub>12</sub>	120.2	119.9	0.25%
C <sub>14</sub> -C <sub>13</sub>	1.457	1.465	0.55%	C <sub>15</sub> -C <sub>14</sub> -C <sub>13</sub>	120.7	120.5	0.17%
C <sub>15</sub> -C <sub>14</sub>	1.417	1.411	0.43%	C <sub>16</sub> -C <sub>15</sub> -C <sub>14</sub>	121.2	120.5	0.58%
C <sub>16</sub> -C <sub>15</sub>	1.455	1.463	0.55%	C <sub>17</sub> -C <sub>16</sub> -C <sub>15</sub>	106.9	107.1	0.19%
C <sub>17</sub> -C <sub>16</sub>	1.439	1.445	0.42%	C <sub>18</sub> -C <sub>17</sub> -C <sub>16</sub>	119.8	120.3	0.42%
C <sub>18</sub> -C <sub>17</sub>	1.383	1.378	0.36%	C <sub>19</sub> -C <sub>18</sub> -C <sub>17</sub>	119.3	119.9	0.50%
C <sub>19</sub> -C <sub>18</sub>	1.433	1.442	0.62%	C <sub>20</sub> -C <sub>19</sub> -C <sub>18</sub>	105.6	106.4	0.75%

C <sub>20</sub> -C <sub>19</sub>	1.440	1.449	0.62%	C <sub>21</sub> -C <sub>20</sub> -C <sub>19</sub>	120.2	120.3	0.08%
C <sub>21</sub> -C <sub>20</sub>	1.381	1.379	0.15%	C <sub>22</sub> -C <sub>21</sub> -C <sub>20</sub>	120.2	120.4	0.17%
C <sub>22</sub> -C <sub>21</sub>	1.439	1.449	0.69%	C <sub>23</sub> -C <sub>22</sub> -C <sub>21</sub>	105.7	106.5	0.75%
C <sub>23</sub> -C <sub>22</sub>	1.433	1.440	0.49%	C <sub>24</sub> -C <sub>23</sub> -C <sub>22</sub>	119.3	119.7	0.33%
C <sub>24</sub> -C <sub>23</sub>	1.383	1.379	0.29%	C <sub>25</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>3</sub>	118.9	118.9	0.00%
C <sub>25</sub> -C <sub>4</sub>	1.415	1.407	0.57%	C <sub>26</sub> -C <sub>25</sub> -C <sub>4</sub>	122.6	122.8	0.16%
C <sub>26</sub> -C <sub>25</sub>	1.458	1.466	0.55%	C <sub>27</sub> -C <sub>26</sub> -C <sub>25</sub>	121.6	120.6	0.83%
C <sub>27</sub> -C <sub>26</sub>	1.418	1.411	0.50%	C <sub>28</sub> -C <sub>27</sub> -C <sub>26</sub>	120.8	120.7	0.08%
C <sub>28</sub> -C <sub>27</sub>	1.458	1.466	0.55%	C <sub>29</sub> -C <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	119.1	118.2	0.76%
C <sub>29</sub> -C <sub>8</sub>	1.458	1.466	0.55%	C <sub>30</sub> -C <sub>29</sub> -C <sub>8</sub>	116.5	117.0	0.43%
C <sub>30</sub> -C <sub>29</sub>	1.412	1.416	0.28%	C <sub>31</sub> -C <sub>10</sub> -C <sub>9</sub>	119.3	119.9	0.50%
C <sub>31</sub> -C <sub>10</sub>	1.390	1.380	0.72%	C <sub>32</sub> -C <sub>31</sub> -C <sub>10</sub>	119.3	120.1	0.67%
C <sub>32</sub> -C <sub>31</sub>	1.427	1.436	0.63%	C <sub>33</sub> -C <sub>32</sub> -C <sub>31</sub>	120.6	119.9	0.58%
C <sub>33</sub> -C <sub>32</sub>	1.417	1.411	0.43%	C <sub>34</sub> -C <sub>33</sub> -C <sub>32</sub>	115.4	115.9	0.43%
C <sub>34</sub> -C <sub>33</sub>	1.427	1.427	0.00%	C <sub>35</sub> -C <sub>34</sub> -C <sub>33</sub>	121.8	122.0	0.16%
C <sub>35</sub> -C <sub>34</sub>	1.421	1.424	0.21%	C <sub>36</sub> -C <sub>35</sub> -C <sub>34</sub>	108.3	108.3	0.00%
C <sub>36</sub> -C <sub>35</sub>	1.445	1.451	0.41%	C <sub>37</sub> -C <sub>16</sub> -C <sub>15</sub>	122.6	122.7	0.08%
C <sub>37</sub> -C <sub>16</sub>	1.417	1.408	0.64%	C <sub>38</sub> -C <sub>37</sub> -C <sub>16</sub>	118.9	118.8	0.08%
C <sub>38</sub> -C <sub>37</sub>	1.470	1.479	0.61%	C <sub>39</sub> -C <sub>38</sub> -C <sub>37</sub>	118.9	118.8	0.08%
C <sub>39</sub> -C <sub>38</sub>	1.417	1.408	0.64%	C <sub>40</sub> -C <sub>20</sub> -C <sub>19</sub>	109.7	109.4	0.27%
C <sub>40</sub> -C <sub>20</sub>	1.427	1.437	0.70%	C <sub>41</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>21</sub>	120.7	120.3	0.33%
C <sub>41</sub> -C <sub>1</sub>	1.418	1.413	0.35%	C <sub>42</sub> -C <sub>19</sub> -C <sub>18</sub>	122.1	121.5	0.49%
C <sub>42</sub> -C <sub>19</sub>	1.412	1.416	0.28%	C <sub>43</sub> -C <sub>42</sub> -C <sub>19</sub>	118.4	118.3	0.08%
C <sub>43</sub> -C <sub>42</sub>	1.465	1.471	0.41%	C <sub>44</sub> -C <sub>43</sub> -C <sub>42</sub>	118.3	118.3	0.00%
C <sub>44</sub> -C <sub>43</sub>	1.412	1.416	0.28%	C <sub>45</sub> -C <sub>15</sub> -C <sub>14</sub>	120.9	120.3	0.50%
C <sub>45</sub> -C <sub>15</sub>	1.429	1.437	0.56%	C <sub>46</sub> -C <sub>45</sub> -C <sub>15</sub>	119.2	119.8	0.50%
C <sub>46</sub> -C <sub>45</sub>	1.388	1.379	0.65%	C <sub>47</sub> -C <sub>13</sub> -C <sub>12</sub>	118.5	118.4	0.08%
C <sub>47</sub> -C <sub>13</sub>	1.412	1.416	0.28%	C <sub>48</sub> -C <sub>47</sub> -C <sub>13</sub>	122.0	121.5	0.41%
C <sub>48</sub> -C <sub>47</sub>	1.433	1.440	0.49%	C <sub>49</sub> -C <sub>48</sub> -C <sub>47</sub>	119.3	119.7	0.33%
C <sub>49</sub> -C <sub>48</sub>	1.382	1.379	0.22%	C <sub>50</sub> -C <sub>49</sub> -C <sub>48</sub>	119.9	120.4	0.42%
C <sub>50</sub> -C <sub>49</sub>	1.440	1.445	0.35%	C <sub>51</sub> -C <sub>50</sub> -C <sub>49</sub>	121.1	120.6	0.41%
C <sub>51</sub> -C <sub>50</sub>	1.415	1.407	0.57%	C <sub>52</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>6</sub>	108.3	108.4	0.09%
C <sub>52</sub> -C <sub>7</sub>	1.443	1.451	0.55%	C <sub>53</sub> -C <sub>52</sub> -C <sub>7</sub>	107.7	108.3	0.55%
C <sub>53</sub> -C <sub>52</sub>	1.453	1.461	0.55%	C <sub>54</sub> -C <sub>53</sub> -C <sub>52</sub>	118.2	117.6	0.51%
C <sub>54</sub> -C <sub>53</sub>	1.449	1.454	0.34%	C <sub>55</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>2</sub>	115.6	116.6	0.86%
C <sub>55</sub> -C <sub>3</sub>	1.439	1.448	0.62%	C <sub>56</sub> -C <sub>41</sub> -C <sub>1</sub>	115.2	116.1	0.78%
C <sub>56</sub> -C <sub>41</sub>	1.426	1.427	0.07%	C <sub>57</sub> -C <sub>56</sub> -C <sub>41</sub>	120.8	121.8	0.82%
C <sub>57</sub> -C <sub>56</sub>	1.422	1.424	0.14%	C <sub>58</sub> -C <sub>57</sub> -C <sub>56</sub>	121.0	121.8	0.66%
C <sub>58</sub> -C <sub>57</sub>	1.426	1.427	0.07%	C <sub>59</sub> -C <sub>58</sub> -C <sub>57</sub>	115.3	116.1	0.69%
C <sub>59</sub> -C <sub>58</sub>	1.418	1.413	0.35%	C <sub>60</sub> -C <sub>48</sub> -C <sub>47</sub>	109.6	109.1	0.46%
C <sub>60</sub> -C <sub>48</sub>	1.439	1.446	0.48%	C <sub>61</sub> -C <sub>60</sub> -C <sub>48</sub>	121.0	120.5	0.41%
C <sub>61</sub> -C <sub>60</sub>	1.415	1.406	0.64%	C <sub>62</sub> -C <sub>61</sub> -C <sub>60</sub>	115.6	116.6	0.86%
C <sub>62</sub> -C <sub>61</sub>	1.438	1.448	0.69%	C <sub>63</sub> -C <sub>40</sub> -C <sub>20</sub>	120.9	120.3	0.50%
C <sub>63</sub> -C <sub>40</sub>	1.417	1.411	0.43%	C <sub>64</sub> -C <sub>22</sub> -C <sub>21</sub>	121.9	121.1	0.66%

C <sub>64</sub> -C <sub>22</sub>	1.412	1.416	0.28%	C <sub>65</sub> -C <sub>64</sub> -C <sub>22</sub>	118.5	118.4	0.08%
C <sub>65</sub> -C <sub>64</sub>	1.466	1.471	0.34%	C <sub>66</sub> -C <sub>65</sub> -C <sub>64</sub>	118.3	118.2	0.08%
C <sub>66</sub> -C <sub>65</sub>	1.412	1.415	0.21%	C <sub>67</sub> -C <sub>26</sub> -C <sub>25</sub>	107.4	107.2	0.19%
C <sub>67</sub> -C <sub>26</sub>	1.428	1.436	0.56%	C <sub>68</sub> -C <sub>67</sub> -C <sub>26</sub>	119.3	119.9	0.50%
C <sub>68</sub> -C <sub>67</sub>	1.390	1.380	0.72%	C <sub>69</sub> -C <sub>28</sub> -C <sub>27</sub>	116.5	117.0	0.43%
C <sub>69</sub> -C <sub>28</sub>	1.412	1.416	0.28%	C <sub>70</sub> -C <sub>69</sub> -C <sub>28</sub>	122.1	121.8	0.25%
C <sub>70</sub> -C <sub>69</sub>	1.433	1.441	0.56%	C <sub>71</sub> -C <sub>70</sub> -C <sub>69</sub>	119.2	119.7	0.42%
C <sub>71</sub> -C <sub>70</sub>	1.383	1.378	0.36%	C <sub>72</sub> -C <sub>71</sub> -C <sub>70</sub>	119.9	120.5	0.50%
C <sub>72</sub> -C <sub>71</sub>	1.436	1.446	0.69%	C <sub>73</sub> -C <sub>72</sub> -C <sub>71</sub>	121.1	120.4	0.58%
C <sub>73</sub> -C <sub>72</sub>	1.414	1.406	0.57%	C <sub>74</sub> -C <sub>34</sub> -C <sub>33</sub>	123.9	123.7	0.16%
C <sub>74</sub> -C <sub>34</sub>	1.445	1.450	0.34%	C <sub>75</sub> -C <sub>74</sub> -C <sub>34</sub>	107.6	108.4	0.74%
C <sub>75</sub> -C <sub>74</sub>	1.449	1.459	0.69%	C <sub>76</sub> -C <sub>75</sub> -C <sub>74</sub>	118.5	117.7	0.68%
C <sub>76</sub> -C <sub>75</sub>	1.448	1.457	0.62%	C <sub>77</sub> -C <sub>38</sub> -C <sub>37</sub>	118.6	117.7	0.76%
C <sub>77</sub> -C <sub>38</sub>	1.446	1.452	0.41%	C <sub>78</sub> -C <sub>63</sub> -C <sub>40</sub>	115.6	116.0	0.34%
C <sub>78</sub> -C <sub>63</sub>	1.427	1.429	0.14%	C <sub>79</sub> -C <sub>78</sub> -C <sub>63</sub>	120.8	121.7	0.74%
C <sub>79</sub> -C <sub>78</sub>	1.421	1.424	0.21%	C <sub>80</sub> -C <sub>79</sub> -C <sub>78</sub>	121.0	122.0	0.82%
C <sub>80</sub> -C <sub>79</sub>	1.427	1.427	0.00%	C <sub>81</sub> -C <sub>80</sub> -C <sub>79</sub>	115.7	115.9	0.17%
C <sub>81</sub> -C <sub>80</sub>	1.418	1.411	0.50%	C <sub>82</sub> -C <sub>70</sub> -C <sub>69</sub>	109.7	109.2	0.46%
C <sub>82</sub> -C <sub>70</sub>	1.437	1.446	0.62%	C <sub>83</sub> -C <sub>82</sub> -C <sub>70</sub>	121.1	120.4	0.58%
C <sub>83</sub> -C <sub>82</sub>	1.416	1.406	0.71%	C <sub>84</sub> -C <sub>79</sub> -C <sub>78</sub>	108.4	108.3	0.09%
C <sub>84</sub> -C <sub>79</sub>	1.445	1.450	0.34%	C <sub>85</sub> -C <sub>86</sub> -Sc <sub>87</sub>	95.0	95.0	0.00%
C <sub>86</sub> -C <sub>85</sub>	1.264	1.272	0.63%	C <sub>43</sub> -C <sub>85</sub> -Sc <sub>88</sub>	94.4	95.2	0.84%
C <sub>86</sub> -Sc <sub>87</sub>	2.158	2.136	1.03%				
C <sub>85</sub> -Sc <sub>88</sub>	2.159	2.140	0.89%				

Table S3 The structural parameters of Sc<sub>2</sub>@C<sub>80</sub> from CNSc.ff and density functional theory (DFT) at B3LYP/6-31G level

	Bond			Angle			
	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	
C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1.435	1.481	3.15%	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	120.4	119.0	1.21%
C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	1.438	1.483	3.03%	C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	108.8	108.8	0.07%
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	1.431	1.443	0.85%	C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	123.8	124.2	0.31%
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.431	1.437	0.40%	C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub>	117.8	117.8	0.00%
C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub>	1.433	1.419	1.02%	C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	121.0	120.1	0.82%
C <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	1.434	1.439	0.29%	C <sub>6</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	108.0	107.8	0.16%
C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	1.435	1.447	0.84%	C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub> -C <sub>9</sub>	121.1	120.9	0.16%
C <sub>8</sub> -C <sub>9</sub>	1.433	1.416	1.19%	C <sub>8</sub> -C <sub>9</sub> -C <sub>10</sub>	118.0	118.4	0.26%
C <sub>9</sub> -C <sub>10</sub>	1.428	1.430	0.13%	C <sub>9</sub> -C <sub>10</sub> -C <sub>11</sub>	121.7	121.4	0.26%
C <sub>10</sub> -C <sub>11</sub>	1.437	1.458	1.39%	C <sub>10</sub> -C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub>	106.4	106.2	0.14%
C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub>	1.436	1.465	2.01%	C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> -C <sub>13</sub>	121.0	121.1	0.03%
C <sub>12</sub> -C <sub>13</sub>	1.427	1.430	0.19%	C <sub>12</sub> -C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub>	116.8	117.6	0.63%
C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub>	1.435	1.416	1.39%	C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub>	121.7	121.9	0.20%
C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub>	1.432	1.452	1.36%	C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub>	108.8	108.4	0.33%

C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub>	1.432	1.430	0.15%	C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub>	121.0	121.1	0.77%
C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub>	1.434	1.428	0.43%	C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub> -C <sub>18</sub>	117.0	117.5	0.40%
C <sub>17</sub> -C <sub>18</sub>	1.432	1.432	0.03%	C <sub>17</sub> -C <sub>18</sub> -C <sub>19</sub>	122.2	121.8	0.40%
C <sub>18</sub> -C <sub>19</sub>	1.430	1.429	0.09%	C <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>20</sub>	116.6	115.7	0.79%
C <sub>1</sub> -C <sub>20</sub>	1.436	1.449	0.90%	C <sub>20</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>21</sub>	114.4	113.1	1.13%
C <sub>1</sub> -C <sub>21</sub>	1.436	1.450	0.95%	C <sub>1</sub> -C <sub>21</sub> -C <sub>22</sub>	123.0	123.4	0.33%
C <sub>21</sub> -C <sub>22</sub>	1.437	1.457	1.37%	C <sub>18</sub> -C <sub>19</sub> -C <sub>23</sub>	120.4	120.4	0.01%
C <sub>19</sub> -C <sub>23</sub>	1.428	1.429	0.11%	C <sub>19</sub> -C <sub>23</sub> -C <sub>24</sub>	118.0	118.3	0.28%
C <sub>23</sub> -C <sub>24</sub>	1.433	1.416	1.17%	C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub> -C <sub>25</sub>	117.6	118.3	0.63%
C <sub>17</sub> -C <sub>25</sub>	1.433	1.423	0.70%	C <sub>17</sub> -C <sub>25</sub> -C <sub>26</sub>	121.2	121.0	0.13%
C <sub>25</sub> -C <sub>26</sub>	1.434	1.438	0.28%	C <sub>25</sub> -C <sub>26</sub> -C <sub>27</sub>	121.0	120.1	0.80%
C <sub>26</sub> -C <sub>27</sub>	1.433	1.419	1.02%	C <sub>26</sub> -C <sub>27</sub> -C <sub>28</sub>	117.8	117.8	0.00%
C <sub>27</sub> -C <sub>28</sub>	1.431	1.437	0.40%	C <sub>27</sub> -C <sub>28</sub> -C <sub>29</sub>	123.8	124.2	0.32%
C <sub>28</sub> -C <sub>29</sub>	1.431	1.443	0.85%	C <sub>28</sub> -C <sub>29</sub> -C <sub>30</sub>	108.9	108.8	0.08%
C <sub>29</sub> -C <sub>30</sub>	1.438	1.483	3.02%	C <sub>10</sub> -C <sub>11</sub> -C <sub>31</sub>	122.9	123.4	0.35%
C <sub>11</sub> -C <sub>31</sub>	1.436	1.450	0.95%	C <sub>11</sub> -C <sub>31</sub> -C <sub>32</sub>	114.4	113.1	1.17%
C <sub>31</sub> -C <sub>32</sub>	1.436	1.449	0.88%	C <sub>8</sub> -C <sub>9</sub> -C <sub>33</sub>	118.0	118.3	0.28%
C <sub>9</sub> -C <sub>33</sub>	1.428	1.429	0.10%	C <sub>9</sub> -C <sub>33</sub> -C <sub>34</sub>	120.4	120.4	0.01%
C <sub>33</sub> -C <sub>34</sub>	1.430	1.429	0.09%	C <sub>6</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>35</sub>	121.2	121.0	0.12%
C <sub>7</sub> -C <sub>35</sub>	1.433	1.423	0.70%	C <sub>7</sub> -C <sub>35</sub> -C <sub>36</sub>	117.6	118.3	0.63%
C <sub>35</sub> -C <sub>36</sub>	1.434	1.428	0.43%	C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>37</sub>	117.0	116.7	0.23%
C <sub>5</sub> -C <sub>37</sub>	1.429	1.421	0.56%	C <sub>5</sub> -C <sub>37</sub> -C <sub>38</sub>	120.3	120.4	0.08%
C <sub>37</sub> -C <sub>38</sub>	1.432	1.452	1.37%	C <sub>37</sub> -C <sub>38</sub> -C <sub>39</sub>	121.6	121.9	0.22%
C <sub>38</sub> -C <sub>39</sub>	1.435	1.416	1.39%	C <sub>38</sub> -C <sub>39</sub> -C <sub>40</sub>	116.8	117.6	0.63%
C <sub>39</sub> -C <sub>40</sub>	1.427	1.430	0.18%	C <sub>39</sub> -C <sub>40</sub> -C <sub>41</sub>	121.1	120.7	0.31%
C <sub>40</sub> -C <sub>41</sub>	1.429	1.430	0.04%	C <sub>21</sub> -C <sub>22</sub> -C <sub>42</sub>	109.0	108.8	0.18%
C <sub>22</sub> -C <sub>42</sub>	1.430	1.429	0.06%	C <sub>22</sub> -C <sub>42</sub> -C <sub>43</sub>	122.2	121.8	0.37%
C <sub>42</sub> -C <sub>43</sub>	1.432	1.432	0.01%	C <sub>42</sub> -C <sub>43</sub> -C <sub>44</sub>	117.0	117.4	0.34%
C <sub>43</sub> -C <sub>44</sub>	1.433	1.423	0.71%	C <sub>43</sub> -C <sub>44</sub> -C <sub>45</sub>	121.2	121.0	0.13%
C <sub>44</sub> -C <sub>45</sub>	1.435	1.438	0.26%	C <sub>44</sub> -C <sub>45</sub> -C <sub>46</sub>	121.0	121.1	0.79%
C <sub>45</sub> -C <sub>46</sub>	1.433	1.419	0.99%	C <sub>27</sub> -C <sub>28</sub> -C <sub>47</sub>	121.2	121.0	0.10%
C <sub>28</sub> -C <sub>47</sub>	1.425	1.433	0.53%	C <sub>28</sub> -C <sub>47</sub> -C <sub>48</sub>	107.9	108.6	0.65%
C <sub>47</sub> -C <sub>48</sub>	1.431	1.443	0.81%	C <sub>47</sub> -C <sub>48</sub> -C <sub>49</sub>	118.3	117.3	0.86%
C <sub>48</sub> -C <sub>49</sub>	1.433	1.452	1.26%	C <sub>48</sub> -C <sub>49</sub> -C <sub>50</sub>	116.5	116.3	0.21%
C <sub>49</sub> -C <sub>50</sub>	1.427	1.429	0.15%	C <sub>49</sub> -C <sub>50</sub> -C <sub>51</sub>	121.1	120.7	0.28%
C <sub>50</sub> -C <sub>51</sub>	1.429	1.429	0.03%	C <sub>50</sub> -C <sub>51</sub> -C <sub>52</sub>	122.3	121.9	0.32%
C <sub>51</sub> -C <sub>52</sub>	1.432	1.433	0.13%	C <sub>51</sub> -C <sub>52</sub> -C <sub>53</sub>	117.3	117.6	0.19%
C <sub>52</sub> -C <sub>53</sub>	1.434	1.422	0.82%	C <sub>52</sub> -C <sub>53</sub> -C <sub>54</sub>	121.0	121.2	0.65%
C <sub>53</sub> -C <sub>54</sub>	1.434	1.436	0.13%	C <sub>53</sub> -C <sub>54</sub> -C <sub>55</sub>	121.3	121.2	0.12%
C <sub>54</sub> -C <sub>55</sub>	1.432	1.424	0.59%	C <sub>54</sub> -C <sub>55</sub> -C <sub>56</sub>	117.6	118.4	0.67%
C <sub>55</sub> -C <sub>56</sub>	1.434	1.422	0.83%	C <sub>42</sub> -C <sub>43</sub> -C <sub>57</sub>	117.0	117.5	0.40%
C <sub>43</sub> -C <sub>57</sub>	1.434	1.428	0.43%	C <sub>45</sub> -C <sub>46</sub> -C <sub>58</sub>	117.6	118.6	0.84%
C <sub>46</sub> -C <sub>58</sub>	1.429	1.421	0.55%	C <sub>48</sub> -C <sub>49</sub> -C <sub>59</sub>	118.7	119.0	0.19%
C <sub>49</sub> -C <sub>59</sub>	1.435	1.415	1.41%	C <sub>51</sub> -C <sub>52</sub> -C <sub>60</sub>	116.8	117.1	0.31%

C <sub>52</sub> -C <sub>60</sub>	1.432	1.424	0.58%	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>61</sub>	120.4	118.9	1.23%
C <sub>2</sub> -C <sub>61</sub>	1.438	1.482	2.98%	C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>62</sub>	107.9	108.6	0.65%
C <sub>4</sub> -C <sub>62</sub>	1.425	1.433	0.53%	C <sub>4</sub> -C <sub>62</sub> -C <sub>63</sub>	121.3	121.1	0.16%
C <sub>62</sub> -C <sub>63</sub>	1.431	1.437	0.40%	C <sub>62</sub> -C <sub>63</sub> -C <sub>64</sub>	117.7	117.7	0.01%
C <sub>63</sub> -C <sub>64</sub>	1.433	1.419	1.00%	C <sub>63</sub> -C <sub>64</sub> -C <sub>65</sub>	121.0	121.1	0.82%
C <sub>64</sub> -C <sub>65</sub>	1.434	1.438	0.28%	C <sub>64</sub> -C <sub>65</sub> -C <sub>66</sub>	121.2	121.0	0.12%
C <sub>65</sub> -C <sub>66</sub>	1.433	1.423	0.70%	C <sub>9</sub> -C <sub>10</sub> -C <sub>67</sub>	120.4	120.4	0.02%
C <sub>10</sub> -C <sub>67</sub>	1.430	1.429	0.06%	C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> -C <sub>68</sub>	109.1	108.5	0.59%
C <sub>12</sub> -C <sub>68</sub>	1.429	1.430	0.05%	C <sub>12</sub> -C <sub>68</sub> -C <sub>69</sub>	122.4	122.0	0.30%
C <sub>68</sub> -C <sub>69</sub>	1.432	1.433	0.12%	C <sub>68</sub> -C <sub>69</sub> -C <sub>70</sub>	116.7	117.1	0.32%
C <sub>69</sub> -C <sub>70</sub>	1.432	1.424	0.59%	C <sub>69</sub> -C <sub>70</sub> -C <sub>71</sub>	121.3	121.2	0.11%
C <sub>70</sub> -C <sub>71</sub>	1.434	1.436	0.13%	C <sub>70</sub> -C <sub>71</sub> -C <sub>72</sub>	121.0	120.2	0.66%
C <sub>71</sub> -C <sub>72</sub>	1.434	1.422	0.83%	C <sub>71</sub> -C <sub>72</sub> -C <sub>73</sub>	117.4	117.6	0.19%
C <sub>72</sub> -C <sub>73</sub>	1.432	1.433	0.13%	C <sub>72</sub> -C <sub>73</sub> -C <sub>74</sub>	122.3	121.9	0.31%
C <sub>73</sub> -C <sub>74</sub>	1.429	1.429	0.03%	C <sub>73</sub> -C <sub>74</sub> -C <sub>75</sub>	121.1	120.7	0.30%
C <sub>74</sub> -C <sub>75</sub>	1.427	1.429	0.15%	C <sub>74</sub> -C <sub>75</sub> -C <sub>76</sub>	116.9	117.6	0.63%
C <sub>75</sub> -C <sub>76</sub>	1.435	1.415	1.42%	C <sub>62</sub> -C <sub>63</sub> -C <sub>77</sub>	117.0	116.7	0.24%
C <sub>63</sub> -C <sub>77</sub>	1.429	1.421	0.56%	C <sub>65</sub> -C <sub>66</sub> -C <sub>78</sub>	117.6	118.3	0.65%
C <sub>66</sub> -C <sub>78</sub>	1.434	1.428	0.44%	C <sub>68</sub> -C <sub>69</sub> -C <sub>79</sub>	117.4	117.6	0.16%
C <sub>69</sub> -C <sub>79</sub>	1.434	1.422	0.82%	C <sub>71</sub> -C <sub>72</sub> -Sc <sub>80</sub>	117.6	118.4	0.67%
C <sub>72</sub> -C <sub>80</sub>	1.432	1.424	0.59%	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -Sc <sub>81</sub>	72.1	71.8	0.44%
C <sub>2</sub> -Sc <sub>81</sub>	2.020	2.142	5.69%	C <sub>29</sub> -C <sub>30</sub> -Sc <sub>82</sub>	81.3	78.4	3.68%
C <sub>30</sub> -Sc <sub>82</sub>	2.020	2.142	5.72%				

Table S4 The structural parameters of C<sub>60</sub> from CNSc.ff and density functional theory (DFT) at B3LYP/6-31G level

	Bond			Angle			
	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	
C <sub>2</sub> -C <sub>1</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>3</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	108.0	108.0	0.00%
C <sub>3</sub> -C <sub>1</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>4</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>1</sub>	108.0	108.0	0.00%
C <sub>4</sub> -C <sub>2</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>5</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>2</sub>	108.1	108.0	0.09%
C <sub>5</sub> -C <sub>4</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>6</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>6</sub> -C <sub>1</sub>	1.403	1.397	0.43%	C <sub>7</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>1</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>7</sub> -C <sub>2</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>8</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>1</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>8</sub> -C <sub>3</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>9</sub> -C <sub>6</sub> -C <sub>1</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>9</sub> -C <sub>6</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>10</sub> -C <sub>6</sub> -C <sub>1</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>10</sub> -C <sub>6</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>11</sub> -C <sub>9</sub> -C <sub>6</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>11</sub> -C <sub>9</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>12</sub> -C <sub>10</sub> -C <sub>6</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>12</sub> -C <sub>10</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>13</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>2</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>13</sub> -C <sub>4</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>14</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>4</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>14</sub> -C <sub>5</sub>	1.401	1.397	0.29%	C <sub>15</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>2</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>15</sub> -C <sub>7</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>16</sub> -C <sub>8</sub> -C <sub>3</sub>	120.0	120.0	0.00%

C <sub>16</sub> -C <sub>8</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>17</sub> -C <sub>15</sub> -C <sub>7</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>17</sub> -C <sub>15</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>18</sub> -C <sub>16</sub> -C <sub>8</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>18</sub> -C <sub>16</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>19</sub> -C <sub>9</sub> -C <sub>6</sub>	108.0	108.0	0.00%
C <sub>19</sub> -C <sub>9</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>20</sub> -C <sub>10</sub> -C <sub>6</sub>	108.0	108.0	0.00%
C <sub>20</sub> -C <sub>10</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>21</sub> -C <sub>13</sub> -C <sub>4</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>21</sub> -C <sub>13</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>22</sub> -C <sub>21</sub> -C <sub>13</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>22</sub> -C <sub>21</sub>	1.401	1.397	0.29%	C <sub>23</sub> -C <sub>11</sub> -C <sub>9</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>23</sub> -C <sub>11</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>24</sub> -C <sub>12</sub> -C <sub>10</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>24</sub> -C <sub>12</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>25</sub> -C <sub>23</sub> -C <sub>11</sub>	108.0	108.0	0.00%
C <sub>25</sub> -C <sub>23</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>26</sub> -C <sub>24</sub> -C <sub>12</sub>	108.0	108.0	0.00%
C <sub>26</sub> -C <sub>24</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>27</sub> -C <sub>17</sub> -C <sub>15</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>27</sub> -C <sub>17</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>28</sub> -C <sub>18</sub> -C <sub>16</sub>	120.1	120.0	0.09%
C <sub>28</sub> -C <sub>18</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>29</sub> -C <sub>27</sub> -C <sub>17</sub>	108.0	108.0	0.00%
C <sub>29</sub> -C <sub>27</sub>	1.456	1.460	0.27%	C <sub>30</sub> -C <sub>19</sub> -C <sub>9</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>30</sub> -C <sub>19</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>31</sub> -C <sub>22</sub> -C <sub>21</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>31</sub> -C <sub>22</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>32</sub> -C <sub>20</sub> -C <sub>10</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>32</sub> -C <sub>20</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>33</sub> -C <sub>23</sub> -C <sub>11</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>33</sub> -C <sub>23</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>34</sub> -C <sub>24</sub> -C <sub>12</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>34</sub> -C <sub>24</sub>	1.401	1.397	0.29%	C <sub>35</sub> -C <sub>25</sub> -C <sub>23</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>35</sub> -C <sub>25</sub>	1.401	1.397	0.29%	C <sub>36</sub> -C <sub>26</sub> -C <sub>24</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>36</sub> -C <sub>26</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>37</sub> -C <sub>27</sub> -C <sub>17</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>37</sub> -C <sub>27</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>38</sub> -C <sub>28</sub> -C <sub>18</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>38</sub> -C <sub>28</sub>	1.401	1.397	0.29%	C <sub>39</sub> -C <sub>30</sub> -C <sub>19</sub>	119.9	120.0	0.09%
C <sub>39</sub> -C <sub>30</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>40</sub> -C <sub>39</sub> -C <sub>30</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>40</sub> -C <sub>39</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>41</sub> -C <sub>29</sub> -C <sub>27</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>41</sub> -C <sub>29</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>42</sub> -C <sub>31</sub> -C <sub>22</sub>	119.9	120.0	0.09%
C <sub>42</sub> -C <sub>31</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>43</sub> -C <sub>33</sub> -C <sub>23</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>43</sub> -C <sub>33</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>44</sub> -C <sub>34</sub> -C <sub>24</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>44</sub> -C <sub>34</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>45</sub> -C <sub>43</sub> -C <sub>33</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>45</sub> -C <sub>43</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>46</sub> -C <sub>44</sub> -C <sub>34</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>46</sub> -C <sub>44</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>47</sub> -C <sub>39</sub> -C <sub>30</sub>	108.0	108.0	0.00%
C <sub>47</sub> -C <sub>39</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>48</sub> -C <sub>44</sub> -C <sub>34</sub>	108.0	108.0	0.00%
C <sub>48</sub> -C <sub>44</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>49</sub> -C <sub>37</sub> -C <sub>27</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>49</sub> -C <sub>37</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>50</sub> -C <sub>38</sub> -C <sub>28</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>50</sub> -C <sub>38</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>51</sub> -C <sub>49</sub> -C <sub>37</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>51</sub> -C <sub>49</sub>	1.401	1.397	0.29%	C <sub>52</sub> -C <sub>50</sub> -C <sub>38</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>52</sub> -C <sub>50</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>53</sub> -C <sub>49</sub> -C <sub>37</sub>	108.0	108.0	0.00%
C <sub>53</sub> -C <sub>49</sub>	1.451	1.460	0.62%	C <sub>54</sub> -C <sub>46</sub> -C <sub>44</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>54</sub> -C <sub>46</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>55</sub> -C <sub>52</sub> -C <sub>50</sub>	119.9	120.0	0.09%
C <sub>55</sub> -C <sub>52</sub>	1.457	1.460	0.21%	C <sub>56</sub> -C <sub>47</sub> -C <sub>39</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>56</sub> -C <sub>47</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>57</sub> -C <sub>48</sub> -C <sub>44</sub>	119.9	120.0	0.09%
C <sub>57</sub> -C <sub>48</sub>	1.402	1.397	0.36%	C <sub>58</sub> -C <sub>53</sub> -C <sub>49</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>58</sub> -C <sub>53</sub>	1.401	1.397	0.29%	C <sub>59</sub> -C <sub>54</sub> -C <sub>46</sub>	120.0	120.0	0.00%
C <sub>59</sub> -C <sub>54</sub>	1.401	1.397	0.29%	C <sub>60</sub> -C <sub>55</sub> -C <sub>52</sub>	120.0	120.0	0.00%



$C_{60}-C_{55}$	1.402	1.397	0.36%
-----------------	-------	-------	-------

Table S5 The structural parameters of  $CH_2NH$  from CNSc.ff and density functional theory (DFT) at B3LYP/6-31G level

	Bond			Angle			
	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	
$C_1-H_2$	1.105	1.097	0.73%	$H_2-C_1-H_3$	120.5	115.7	4.15%
$C_1-H_3$	1.102	1.089	1.19%	$H_3-C_1-N_4$	117.7	118.4	0.59%
$C_1-N_4$	1.239	1.282	3.35%	$C_1-N_4-H_5$	109.8	113.6	3.35%
$N_4-H_5$	0.997	1.032	3.39%				

Table S6 The structural parameters of  $Sc_2C_2$  from CNSc.ff and density functional theory (DFT) at B3LYP/6-31G level

	Bond			Angle			
	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	CNSc.ff	DFT/6-31G	Error	
$Sc_1-Sc_2$	3.794	3.883	2.29%	$Sc_2-Sc_1-C_3$	18.3	19.7	7.11%
$Sc_1-C_3$	2.023	2.062	1.89%	$Sc_1-C_3-C_4$	68.7	70.3	2.28%
$C_3-C_4$	1.366	1.390	1.73%				

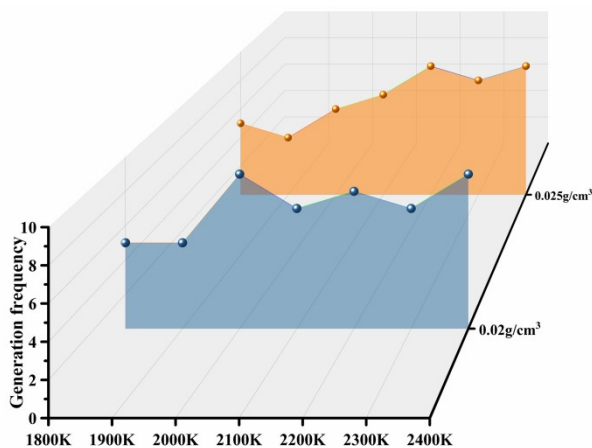


Fig. S2 Generation frequency of  $Sc_3N@C_n$

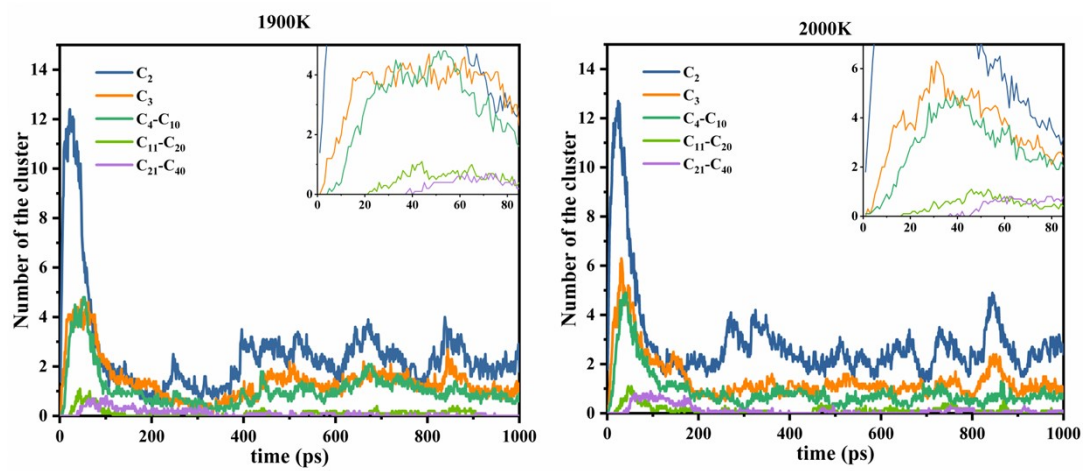


Fig. S3 The number of different clusters during the simulation

## ReaxFF Force Field

39 ! Number of general parameters  
50.0000 !p\_boc1 Eq(4c): Overcoordination parameter  
9.5469 !p\_boc2 Eq(4d): Overcoordination parameter  
26.5405 !p\_coa2 Eq(15): Valency angle conjugation  
1.7224 !p\_trip4 Eq(20): Triple bond stabilisation  
6.8702 !p\_trip3 Eq(20): Triple bond stabilisation  
60.4850 !k\_c2 Eq(19): C2-correction  
1.0588 !p\_ovun6 Eq(12): Undercoordination  
4.6000 !p\_trip2 Eq(20): Triple bond stabilisation  
12.1176 !p\_ovun7 Eq(12): Undercoordination  
13.3056 !p\_ovun8 Eq(12): Undercoordination  
-70.5044 !p\_trip1 Eq(20): Triple bond stabilization  
0.0000 !Lower Taper-radius (must be 0)  
10.0000 !R\_cut Eq(21): Upper Taper-radius  
2.8793 !p\_fe1 Eq(6a): Fe dimer correction  
33.8667 !p\_val6 Eq(13c): Valency undercoordination  
6.0891 !p\_lp1 Eq(8): Lone pair param  
1.0563 !p\_val9 Eq(13f): Valency angle exponent  
2.0384 !p\_val10 Eq(13g): Valency angle parameter  
6.1431 !p\_fe2 Eq(6a): Fe dimer correction  
6.9290 !p\_pen2 Eq(14a): Double bond/angle param  
0.3989 !p\_pen3 Eq(14a): Double bond/angle param  
3.9954 !p\_pen4 Eq(14a): Double bond/angle param  
-2.4837 !p\_fe3 Eq(6a): Fe dimer correction  
5.7796 !p\_tor2 Eq(16b): Torsion/BO parameter  
10.0000 !p\_tor3 Eq(16c): Torsion overcoordination  
1.9487 !p\_tor4 Eq(16c): Torsion overcoordination  
-1.2327 !p\_elho Eq(26a): electron-hole interaction  
2.1645 !p\_cot2 Eq(17b): Conjugation if tors13=0  
1.5591 !p\_vdW1 Eq(23b): vdWaals shielding  
0.1000 !Cutoff for bond order (\*100)  
2.1365 !p\_coa4 Eq(15): Valency angle conjugation  
0.6991 !p\_ovun4 Eq(11b): Over/Undercoordination  
50.0000 !p\_ovun3 Eq(11b): Over/Undercoordination  
1.8512 !p\_val8 Eq(13d): Valency/lone pair param  
0.5000 !X\_soft Eq(25): ACKS2 softness for X\_ij  
20.0000 !d Eq(23d): Scale factor in lg-dispersion  
5.0000 !p\_val Eq(27): Gauss exponent for electrons  
0.0000 !1 Eq(13e): disable undecoord in val angle  
2.6962 !p\_coa3 Eq(15): Valency angle conjugation  
5 ! 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.;bo131;bo132;bo133;softcut;n.u.
ov/un;vall;n.u.;val3,vval4
C  1.3674  4.0000 12.0000  2.0453  0.1444  0.8458  1.1706  4.0000
   9.0000  1.5000  4.0000 29.4878 79.5548  5.4674  6.0000  0.0000
   1.1668  0.0000 181.0000 14.2732 24.4406  6.7313  0.8558  0.0000
  -3.9334  5.0008  1.0564  4.0000  2.9663  0.0500  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
N   1.1466  3.0000 14.0000  2.3431  0.1082  0.6787  1.1548  5.0000
  12.0736  4.5288  4.0000 28.0790 100.0000  6.6446  6.5375  2.0000
   1.3613 15.2860 129.9837 122.4282 13.8571 11.1468  0.9845  0.0000
  -6.2500  2.6000  1.0183  4.0000  3.0303  0.0000  0.0000  0.0000
Sc  2.0802  3.0000 44.9559  1.0956  0.1498  0.5275 -1.0000  3.0000
  11.0202  1.6000  3.0000 13.8863 86.7409 -5.7129  7.4745  0.0000
  -1.0000  0.0000 91.7672  0.0138  0.0051  5.2540  1.1007  0.0000
   0.0000  2.0733  1.0094  1.5000  2.9861  0.0000  0.0000  0.0000
He -0.1000  2.0000  4.0026  1.3000  0.0050  0.5000 -0.1000  4.0000
  12.0000  4.0000  4.0000  0.0000  0.0000  5.0000 13.0000  0.0000
  -0.1000  0.0000 -2.3700  6.4918  8.5961  0.2368 10.8563  0.0000
  -5.0000  3.1873  1.0338  6.2998  2.5791  2.0000  3.0000 11.5000
9   ! Nr of bonds; Edis1;LPpen;n.u.;pbe1;pbo5;l3corr;pbo6
      pbe2;pbo3;pbo4;n.u.;pbo1;pbo2;ovcorr
1  1  88.8853 107.9956 52.0729  0.5218 -0.3647  1.0000 34.9982  0.7768
   6.1249 -0.1693  8.0821  1.0000 -0.0586  8.1832  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 -0.0553  6.9316  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  3 165.9874 115.0965  0.0000 -0.7037 -0.0300  1.0000 18.0000  0.6593
   1.2099 -0.2441  4.3694  1.0000 -0.2365  7.8000  1.0000  0.0000
3  3 110.7384  0.0000  0.0000  0.3110 -0.1184  1.0000 10.0000  0.4428
   0.5588 -0.2000  8.0186  1.0000 -0.0591  4.9971  1.0000  0.0000
2  3 208.1369  0.0000  0.0000 -0.3949  0.0000  1.0000  6.0000  0.3340
   6.0174  1.0000  0.0000  1.0000 -0.1026  5.5235  0.0000  0.0000
1  4  78.0000  0.0000  0.0000  0.2500 -0.5000  1.0000 35.0000  0.6000
   0.4000 -0.2500 15.0000  1.0000 -0.1000 10.0000  1.0000  0.0000
3  4 750.0000  0.0000  0.0000  0.3300 -0.3000  1.0000 36.0000  0.5500
   0.3400 -0.2000 15.0000  1.0000 -0.1000 10.0000  1.0000  0.0000
4  4  56.8290  0.0000  0.0000  0.6031 -0.2000  1.0000 16.0000  0.4442
   0.4759 -0.2500 15.0000  1.0000 -0.1789  8.7946  0.0000  0.0000
5   ! 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	0.1275	1.3000	9.8924	1.0418	-1.0000	-1.0000			
1	3	0.2092	1.9013	9.5854	1.3184	1.2195	1.1533			
1	4	0.1290	1.6500	10.5600	1.2900	-1.0000	-1.0000			
3	4	0.0959	1.6800	10.7589	2.0129	-1.0000	-1.0000			
18	! Nr of angles;at1;at2;at3;Thetao,o;ka;kb;pv1;pv2									
1	1	1	68.1748	30.9669	0.9699	0.0000	0.0082	0.3589	2.5747	
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	
2	1	3	63.9629	41.6246	1.4921	0.0000	0.2000	0.0000	2.8070	
1	2	3	0.0000	0.0019	6.3000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
2	3	3	79.7136	45.0000	0.5316	0.0000	0.5437	0.0000	1.0000	
2	3	2	80.2201	6.8385	7.5000	0.0000	0.1000	0.0000	1.0000	
1	2	3	0.0000	0.2694	2.1363	0.0000	0.0000	0.0000	1.8036	
3	2	3	0.0000	0.0100	1.0929	0.0000	0.0000	0.0000	2.1728	
2	2	3	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
1	1	3	0.0000	20.0000	2.2491	0.0000	1.1834	0.0000	3.0000	
3	1	3	112.4210	70.1792	0.6055	0.0000	2.6055	0.0000	2.6000	
1	3	1	71.6778	10.6495	3.0486	0.0000	3.2902	98.5000	1.4000	
1	3	3	0.0000	0.0000	2.8540	-1.0000	2.8701	0.0000	1.0631	
3	3	3	0.0000	0.0000	2.2561	0.0000	2.9983	0.0000	2.1573	
17	! 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	-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	3	2	-1.0000	71.4280	-0.5000	-8.0000	-1.9825	0.0000	0.0000
2	1	3	2	-1.0000	63.9914	0.7449	-8.0000	-2.1051	0.0000	0.0000
3	1	1	3	-1.0000	21.8427	1.0000	-4.0686	-1.7241	0.0000	0.0000
1	1	3	1	1.0000	83.8750	1.0000	-6.5279	-1.6589	0.0000	0.0000
2	1	1	3	1.0000	98.8297	-0.2745	-4.9954	-1.9000	0.0000	0.0000
2	3	1	3	0.5000	2.8273	-0.1650	-7.9605	-2.0202	0.0000	0.0000
1	3	1	2	-1.0000	92.9120	-0.4541	-7.7688	-1.5996	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	1	1	0	0.0000	50.0000	0.3000	-4.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
0	1	3	0	0.2176	40.4126	0.3535	-3.9875	-2.0051	0.0000	0.0000
0	2	3	0	0.0000	0.1032	0.3000	-5.0965	0.0000	0.0000	0.0000
0	3	3	0	0.7265	44.3155	1.0000	-4.4046	-2.0000	0.0000	0.0000
3	1	3	3	-0.0949	8.7582	0.3310	-7.9430	-2.0000	0.0000	0.0000
0	! Nr of hydrogen bonds;at1;at2;at3;Rhb;Dehb;vhb1									