

Reactive MD-force field: Fe/C/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
 -55.1978 !Triple bond stabilization energy
 0.0000 !Lower Taper-radius
 10.0000 !Upper Taper-radius
 2.8793 !Not used
 33.8667 !Valency undercoordination
 6.0891 !Valency angle/lone pair parameter
 1.0563 !Valency angle
 2.0384 !Valency angle parameter
 6.1431 !Not used
 6.9290 !Double bond/angle parameter
 0.3989 !Double bond/angle parameter: overcoord
 3.9954 !Double bond/angle parameter: overcoord
 -2.4837 !Not used
 5.7796 !Torsion/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

8 ! Nr of atoms; cov.r; valency;a.m;Rvdw;Evdw;gammaEEM;cov.r2;#
 alfa;gammavdW;valency;Eunder;Eover;chiEEM;etaEEM;n.u.
 cov r3;Elp;Heat inc.;n.u.;n.u.;n.u.;n.u.
 ov/un;val1;n.u.;val3,vval4

C 1.3817 4.0000 12.0000 1.8903 0.1838 0.9000 1.1341 4.0000
 9.7559 2.1346 4.0000 34.9350 79.5548 5.9666 7.0000 0.0000
 1.2114 0.0000 202.6057 8.9539 34.9289 13.5366 0.8563 0.0000
 -2.8983 2.5000 1.0564 4.0000 2.9663 0.0000 0.0000 0.0000

H 0.8930 1.0000 1.0080 1.3550 0.0930 0.8203 -0.1000 1.0000
 8.2230 33.2894 1.0000 0.0000 121.1250 3.7248 9.6093 1.0000
 -0.1000 0.0000 61.6606 3.0408 2.4197 0.0003 1.0698 0.0000
 -19.4571 4.2733 1.0338 1.0000 2.8793 0.0000 0.0000 0.0000

O 1.2450 2.0000 15.9990 2.3890 0.1000 1.0898 1.0548 6.0000
 9.7300 13.8449 4.0000 37.5000 116.0768 8.5000 8.3122 2.0000
 0.9049 0.4056 59.0626 3.5027 0.7640 0.0021 0.9745 0.0000
 -3.5500 2.9000 1.0493 4.0000 2.9225 0.0000 0.0000 0.0000

Fe	1.9306	3.0000	55.8450	2.1229	0.1163	0.4744	-1.6836	3.0000	
	10.4193	7.0680	3.0000	0.0000	18.3725	1.7785	8.6281	0.0000	
	-1.2000	0.0000	66.4838	25.3430	10.1260	0.7590	0.8563	0.0000	
	-16.0573	2.6997	1.0338	6.0000	2.5791	0.0000	0.0000	0.0000	
Cl	1.7140	1.0000	35.4500	1.9139	0.2000	0.3837	-1.0000	7.0000	
	11.5345	10.1330	1.0000	0.0000	0.0000	9.9614	6.5316	0.0000	
	-1.0000	3.5750	143.1770	6.2293	5.2294	0.1542	0.8563	0.0000	
	-10.2080	2.9867	1.0338	6.2998	2.5791	0.0000	0.0000	0.0000	
Si	2.1932	4.0000	28.0600	1.8951	0.1737	0.8112	1.2962	4.0000	
	11.3429	5.2054	4.0000	21.7115	139.9309	4.0081	5.7104	0.0000	
	-1.0000	0.0000	128.2031	9.0751	23.8188	0.8381	0.8563	0.0000	
	-4.1684	2.0754	1.0338	4.0000	2.5791	1.4000	0.2000	13.0000	
Al	2.1967	3.0000	26.9820	2.3738	0.2328	0.4265	-1.6836	3.0000	
	9.4002	3.9009	3.0000	0.0076	16.5151	1.7429	6.8319	0.0000	
	-1.0000	0.0000	78.4675	20.0000	0.2500	0.0000	0.8563	0.0000	
	-22.7101	1.7045	1.0338	8.0000	2.5791	1.4000	0.2000	13.0000	
X	-0.1000	2.0000	1.0080	2.0000	0.0000	0.4744	-0.1000	6.0000	
	10.0000	2.5000	4.0000	0.0000	0.0000	4.0000	15.0000	0.0000	
	-0.1000	0.0000	127.6226	8.7410	13.3640	0.6690	0.9745	0.0000	
	-11.0000	2.7466	1.0338	6.2998	2.8793	0.0000	0.0000	0.0000	
25	! 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
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
1	4	113.1509	0.0000	0.0000	0.6400	-0.3000	1.0000	36.0000	0.0100
		1.0000	-0.3500	15.0000	1.0000	-0.1450	4.1504	1.0000	0.0000
2	4	78.2669	0.0000	0.0000	0.4668	0.0000	1.0000	6.0000	0.1766
		0.5673	1.0000	0.0000	1.0000	-0.1543	5.4965	0.0000	0.0000
3	4	77.2864	0.0000	0.0000	0.3288	-0.3000	1.0000	36.0000	0.1023
		1.0000	-0.3500	15.0000	1.0000	-0.1109	7.6514	1.0000	0.0000
4	4	44.2147	0.0000	0.0000	0.2236	-0.2000	0.0000	16.0000	0.2849
		0.4922	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.0552	6.7583	0.0000	0.0000
2	5	109.1686	0.0000	0.0000	-0.1657	-0.2000	0.0000	16.0000	1.2500
		2.8463	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1111	5.2687	0.0000	0.0000
3	5	0.0000	0.0000	0.0000	0.5000	-0.2000	0.0000	16.0000	0.5000
		1.0001	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000	0.0000
4	5	0.0000	0.0000	0.0000	0.2500	-0.2000	0.0000	16.0000	0.5000
		0.5000	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	0.0000	0.0000
5	5	0.2500	0.0000	0.0000	0.1803	-0.2000	0.0000	16.0000	0.3356
		0.9228	-0.2000	15.0000	1.0000	-0.1178	5.6715	0.0000	0.0000
1	6	0.0000	0.0000	0.0000	-0.6528	-0.3000	0.0000	36.0000	0.5000
		10.0663	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000	0.0000
2	6	250.0000	0.0000	0.0000	-0.7128	0.0000	1.0000	6.0000	0.1186
		18.5790	1.0000	0.0000	1.0000	-0.0731	7.4983	0.0000	0.0000
3	6	261.9074	5.9533	0.0000	-0.6223	-0.3000	1.0000	36.0000	0.7275
		10.1541	-0.2366	29.7817	1.0000	-0.1083	8.5924	6.0658	0.0000
4	6	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.3000	0.0000	26.0000	1.0000

			0.5000	0.0000	12.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	0.0000	0.0000
6	6	70.9120	54.0531	30.0000	0.4931	-0.3000	1.0000	16.0000	0.0392	
			0.2476	-0.8055	7.1248	1.0000	-0.1009	8.7229	0.0000	0.0000
1	7	0.0000	0.0000	0.0000	-0.6528	-0.3000	0.0000	36.0000	0.5000	
			10.0663	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000	0.0000
2	7	0.8579	0.0000	0.0000	-0.6528	-0.3000	0.0000	36.0000	0.1551	
			10.0663	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.0842	7.1758	0.0000	0.0000
3	7	227.9327	0.0000	0.0000	-0.8375	-0.3000	0.0000	36.0000	0.1286	
			0.3686	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.1740	5.2057	0.0000	0.0000
4	7	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.3000	0.0000	26.0000	1.0000	
			0.5000	0.0000	12.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	0.0000	0.0000
6	7	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.3000	0.0000	26.0000	1.0000	
			0.5000	0.0000	12.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	0.0000	0.0000
7	7	34.0777	0.0000	0.0000	0.4832	-0.3000	0.0000	16.0000	0.5154	
			6.4631	-0.4197	14.3085	1.0000	-0.1463	6.1608	0.0000	0.0000
17	! Nr of off-diagonal terms; Ediss;Ro;gamma;rsigma;rpi;rpi2									
1	2	0.1239	1.4004	9.8467	1.1210	-1.0000	-1.0000			
2	3	0.0283	1.2885	10.9190	0.9215	-1.0000	-1.0000			
1	3	0.1345	1.8422	9.7725	1.2835	1.1576	1.0637			
1	4	0.3999	1.4558	11.0036	1.3918	-1.0000	-1.0000			
2	4	0.0200	1.9451	10.8595	1.4157	-1.0000	-1.0000			
3	4	0.0502	1.3407	10.1767	1.7735	-1.0000	-1.0000			
2	5	0.0568	1.6740	9.6297	1.2200	-1.0000	-1.0000			
3	5	0.1927	2.2551	11.2308	-1.0000	-1.0000	-1.0000			
4	5	0.1500	2.1500	11.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000			
1	6	0.2000	1.9000	12.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000			
2	6	0.1043	1.5000	11.8720	1.3005	-1.0000	-1.0000			
3	6	0.2000	1.9048	10.8374	1.7163	1.2444	-1.0000			
4	6	0.1000	2.0000	11.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000			
1	7	0.2000	1.9000	12.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000			
2	7	0.0564	1.4937	12.0744	1.7276	-1.0000	-1.0000			
3	7	0.1745	1.8928	11.2476	1.5382	-1.0000	-1.0000			
6	7	0.0295	1.5025	11.8687	-1.0000	-1.0000	-1.0000			
66	! 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	
2	1	3	65.0000	16.3141	5.2730	0.0000	0.4448	0.0000	1.4077	
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	
3	3	3	80.7324	30.4554	0.9953	0.0000	3.0000	50.0000	1.0783	
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	2	85.8000	9.8453	2.2720	0.0000	2.8635	0.0000	1.5800	
1	2	3	0.0000	25.0000	3.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0400	
3	2	3	0.0000	15.0000	2.8900	0.0000	0.0000	0.0000	2.8774	
2	2	3	0.0000	8.5744	3.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0421	
1	4	1	7.0546	39.3227	1.0694	0.0000	0.7210	0.0000	3.1133	
1	1	4	29.2291	39.0677	1.2584	0.0000	0.0100	0.0000	1.6263	
1	4	4	47.3783	1.0170	7.8341	0.0000	2.8546	0.0000	1.0000	
4	1	4	33.2812	34.6443	3.0111	0.0000	0.1701	0.0000	1.0510	
2	1	4	0.0100	25.4983	1.5660	0.0000	0.0839	0.0000	1.2521	

2	4	2	20.3683	0.0100	2.2825	0.0000	0.7660	0.0000	1.3788
2	2	4	0.0000	0.0100	1.0568	0.0000	1.8595	0.0000	3.6142
4	2	4	0.0000	10.4428	7.9607	0.0000	2.3717	0.0000	1.1970
2	4	4	48.4128	4.0632	0.6773	0.0000	2.2274	0.0000	1.8605
2	4	4	180.0000	-5.3883	21.7804	0.0000	0.5866	0.0000	1.0000
1	3	4	38.1871	14.3372	1.1301	0.0000	1.0108	0.0000	1.1000
3	1	4	59.8640	25.0000	2.5000	0.0000	2.0000	0.0000	1.1000
3	4	3	47.8282	0.0100	1.9197	0.0000	0.1248	0.0000	2.5839
4	3	4	43.8679	14.3345	8.0000	0.0000	0.0636	0.0000	1.6997
2	3	4	26.0012	49.6772	0.0500	0.0000	1.1589	0.0000	1.0000
3	3	4	73.6721	32.6330	1.7223	0.0000	1.0221	0.0000	1.4351
3	4	4	68.7142	3.0974	8.0000	0.0000	0.0907	0.0000	1.0000
3	2	4	0.0000	0.0100	3.2567	0.0000	2.0582	0.0000	1.3513
2	4	3	38.5594	11.2599	0.1898	0.0000	0.1904	0.0000	1.4041
3	2	5	0.0000	0.0100	0.5211	0.0000	0.0000	0.0000	1.3859
1	4	2	44.2808	0.3810	0.0100	0.0000	0.2603	0.0000	1.9721
1	2	4	0.8171	0.0100	2.8321	0.0000	2.4786	0.0000	2.3245
6	6	6	78.5339	36.4328	1.0067	0.0000	0.1694	0.0000	1.6608
2	6	6	77.2616	5.0190	7.8944	0.0000	4.0000	0.0000	1.0400
2	6	2	75.7983	14.4132	2.8640	0.0000	4.0000	0.0000	1.0400
3	6	6	90.6812	31.1846	4.4543	0.0000	0.5073	0.0000	2.1809
2	6	3	73.6998	40.0000	1.8782	0.0000	4.0000	0.0000	1.1290
3	6	3	80.1361	36.2368	0.9504	0.0000	0.2624	0.0000	2.0787
6	3	6	80.4450	6.0739	1.7731	0.0000	3.2548	0.0000	1.0422
2	3	6	86.7611	7.1742	1.4013	0.0000	1.4999	0.0000	1.0400
3	3	6	103.4529	26.9589	1.3470	0.0000	1.7728	0.0000	1.3091
2	2	6	0.0000	47.1300	6.0000	0.0000	1.6371	0.0000	1.0400
6	2	6	0.0000	27.4206	6.0000	0.0000	1.6371	0.0000	1.0400
3	2	6	0.0000	5.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
3	2	7	0.0000	4.2750	1.0250	0.0000	1.3750	0.0000	1.4750
2	2	7	0.0000	3.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500
7	2	7	0.0000	20.2391	0.1328	0.0000	2.9860	0.0000	1.0870
2	3	7	90.0000	19.7491	1.8227	0.0000	1.0000	0.0000	2.5337
3	3	7	34.4326	25.9544	5.1239	0.0000	2.7500	0.0000	1.7141
7	3	7	23.7270	19.5973	4.0000	0.0000	0.6619	0.0000	1.9380
2	7	2	67.4229	4.5148	5.9702	0.0000	3.0000	0.0000	2.6879
2	7	3	41.8108	17.3800	2.6618	0.0000	0.7372	0.0000	1.0100
3	7	3	54.0864	9.7594	1.9476	0.0000	3.0000	0.0000	1.4400
2	7	7	180.0000	-26.7860	7.3549	0.0000	1.0000	0.0000	1.0252
2	7	7	78.2279	37.6504	0.4809	0.0000	1.0000	0.0000	2.9475
6	3	7	15.7093	0.0100	2.7033	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000
3	6	7	88.2703	0.3954	0.2500	0.0000	0.5000	0.0000	2.1060
3	7	6	83.8306	0.3712	0.2500	0.0000	0.5000	0.0000	2.1153
33	! 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
1	1	1	2	-0.2500	29.2131	0.2945	-4.9581	-2.1802	0.0000
2	1	1	2	-0.2500	31.2081	0.4539	-4.8923	-2.2677	0.0000
1	1	1	3	1.2799	20.7787	-0.5249	-2.5000	-1.0000	0.0000
2	1	1	3	1.9159	19.8113	0.7914	-4.6995	-1.0000	0.0000
3	1	1	3	-1.4477	16.6853	0.6461	-4.9622	-1.0000	0.0000
1	1	3	1	0.4816	19.6316	-0.0057	-2.5000	-1.0000	0.0000
1	1	3	2	1.2044	80.0000	-0.3139	-6.1481	-1.0000	0.0000
2	1	3	1	-2.5000	31.0191	0.6165	-2.7733	-2.9807	0.0000
2	1	3	2	-2.4875	70.8145	0.7582	-4.2274	-3.0000	0.0000
1	1	3	3	-0.3566	10.0000	0.0816	-2.6110	-1.9631	0.0000
2	1	3	3	-1.4383	80.0000	1.0000	-3.6877	-2.8000	0.0000
3	1	3	1	-1.1390	78.0747	-0.0964	-4.5172	-3.0000	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	0.0000	0.0000	0.0000
0	3	3	0	0.5511	25.4150	1.1330	-5.1903	-1.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	3	-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
2	6	6	2	0.0000	0.0000	0.0640	-2.4426	0.0000	0.0000	0.0000
2	6	6	6	0.0000	0.0000	0.1587	-2.4426	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	6	0	0.0000	0.0000	0.1200	-2.4847	0.0000	0.0000	0.0000
2	1	4	4	0.0000	0.0000	0.0000	-5.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	! Nr of hydrogen bonds;at1;at2;at3;Rhb;Dehb;vhb1									
3	2	3		2.1200	-3.5800	1.4500	19.5000			