

DATE: 2019-11-26 CONTRIBUTOR: Z. G. Fthenakis at al COMMENT: hybrid RDX and C-2013 for graphene (Cg) + C/H/O/N

39 ! Number of general parameters
50.0000 !Overcoordination parameter
9.4514 !Overcoordination parameter
30.0000 !Valency angle conjugation parameter
216.4305 !Triple bond stabilisation parameter
12.4838 !Triple bond stabilisation parameter
0.0000 !C2-correction
1.0701 !Undercoordination parameter
7.5000 !Triple bond stabilisation parameter
11.9083 !Undercoordination parameter
13.3822 !Undercoordination parameter
-10.4637 !Triple bond stabilization energy
0.0000 !Lower Taper-radius
10.0000 !Upper Taper-radius
2.8793 !Not used
33.8667 !Valency undercoordination
3.5895 !Valency angle/lone pair parameter
1.0563 !Valency angle
2.0384 !Valency angle parameter
6.1431 !Not used
6.9290 !Double bond/angle parameter
0.0283 !Double bond/angle parameter: overcoord
0.0570 !Double bond/angle parameter: overcoord
-2.4837 !Not used
5.8374 !Torsion/BO parameter
10.0000 !Torsion overcoordination
1.8820 !Torsion overcoordination
1.2327 !Conjugation 0 (not used)
2.1861 !Conjugation
1.5591 !vdWaals shielding
0.0100 !Cutoff for bond order (*100)
5.2216 !Valency angle conjugation parameter
3.4021 !Overcoordination parameter
38.5241 !Overcoordination parameter
2.1533 !Valency/lone pair parameter
0.5000 !Not used
20.0000 !Not used
5.0000 !Molecular energy (not used)
2.0000 !Version number
6.5560 !Valency angle conjugation parameter
5 ! Nr of atoms; atomID;ro(sigma); Val;atom mass;Rvdw;Dij;gamma
alfa;gamma(w);Val(angle);p(ovun5);n.u.;chiEEM;etaEEM;n.u.
ro(pipi);p(lp2);Heat increment;p(boc4);p(boc3);p(boc5),n.u.;n.u.
p(ovun2);p(val3);n.u.; Val(boc);p(val5);n.u.;n.u.;n.u.
C 1.3742 4.0000 12.0000 1.9684 0.1723 0.8712 1.2385 4.0000
9.4606 2.1346 4.0000 31.0823 79.5548 5.7254 6.9235 0.0000
1.2104 0.0000 183.7012 5.7419 33.3951 11.9957 0.8563 0.0000

-2.8983 2.5000 1.0564 4.0000 2.9663 0.0000 0.0000 0.0000
 H 0.6867 1.0000 1.0080 1.3525 0.0616 0.8910 -0.1000 1.0000
 9.3858 5.0013 1.0000 0.0000 121.1250 3.8446 10.0839 1.0000
 -0.1000 0.0000 58.4228 3.8461 3.2540 1.0000 1.0698 0.0000
 -15.7683 2.1504 1.0338 1.0000 2.8793 0.0000 0.0000 0.0000
 O 1.3142 2.0000 15.9990 1.9741 0.0880 0.8712 1.1139 6.0000
 10.2186 7.7719 4.0000 29.5271 116.0768 8.5000 7.1412 2.0000
 0.9909 14.9473 69.2812 9.1371 1.6258 0.1863 0.9745 0.0000
 -3.5965 2.5000 1.0493 4.0000 2.9225 0.0000 0.0000 0.0000
 N 1.2450 3.0000 14.0000 1.9951 0.1088 1.0512 1.1911 5.0000
 9.9303 7.8431 4.0000 32.4758 100.0000 6.7768 6.8035 2.0000
 1.0636 0.1045 128.0119 2.1604 2.9464 2.5181 0.9745 0.0000
 -4.0959 2.0047 1.0183 4.0000 2.8793 0.0000 0.0000 0.0000
 Cg 1.3674 4.0000 12.0000 2.0453 0.1444 0.7920 1.1706 4.0000
 9.0000 1.5000 4.0000 27.5134 79.5548 6.7897 6.0000 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
 15 ! Nr of bonds; at1;at2;De(sigma);De(pi);De(pipi);p(be1);p(b
 p(be2);p(bo3);p(bo4);n.u.;p(bo1);p(bo2)
 1 1 141.9346 113.4487 67.6027 0.1554 -0.3045 1.0000 30.4515 0.4283
 0.0801 -0.2113 8.5395 1.0000 -0.0933 6.6967 1.0000 0.0000
 1 2 163.6889 0.0000 0.0000 -0.4525 0.0000 1.0000 6.0000 0.5921
 12.1053 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0097 8.6351 0.0000 0.0000
 2 2 169.8421 0.0000 0.0000 -0.3591 0.0000 1.0000 6.0000 0.7503
 9.3119 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0169 5.9406 0.0000 0.0000
 1 3 164.0476 117.4881 72.1261 -0.6031 -0.1795 1.0000 14.9755 0.5413
 1.2626 -0.3063 7.0000 1.0000 -0.1588 4.5000 0.0000 0.0000
 3 3 110.4748 155.6441 40.0000 0.1150 -0.1054 1.0000 28.5221 0.2000
 0.9590 -0.2635 8.5715 1.0000 -0.1007 6.8548 1.0000 0.0000
 1 4 130.7147 175.2276 97.2523 -0.0368 -0.4942 1.0000 26.7545 0.5133
 0.3296 -0.3653 7.0000 1.0000 -0.1171 5.1025 1.0000 0.0000
 3 4 85.4950 114.0081 70.1453 0.5778 -0.1070 1.0000 16.6611 0.2339
 0.3474 -0.1948 8.3762 1.0000 -0.1089 5.8148 1.0000 0.0000
 4 4 157.7518 67.1322 160.9732 -0.5869 -0.1824 1.0000 12.0000 0.7136
 0.8204 -0.1657 10.6490 1.0000 -0.0967 4.5976 1.0000 0.0000
 2 3 224.3076 0.0000 0.0000 -0.6280 0.0000 1.0000 6.0000 1.0000
 5.0050 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0512 5.1982 0.0000 0.0000
 2 4 212.1772 0.0000 0.0000 -0.3585 0.0000 1.0000 6.0000 0.3316
 10.4316 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0658 6.4545 0.0000 0.0000
 1 5 141.9346 113.4487 67.6027 0.1554 -0.3045 1.0000 30.4515 0.4283
 0.0801 -0.2113 8.5395 1.0000 -0.0933 6.6967 1.0000 0.0000
 2 5 163.6889 0.0000 0.0000 -0.4525 0.0000 1.0000 6.0000 0.5921
 12.1053 1.0000 0.0000 1.0000 -0.0097 8.6351 0.0000 0.0000
 3 5 164.0476 117.4881 72.1261 -0.6031 -0.1795 1.0000 14.9755 0.5413
 1.2626 -0.3063 7.0000 1.0000 -0.1588 4.5000 0.0000 0.0000
 4 5 130.7147 175.2276 97.2523 -0.0368 -0.4942 1.0000 26.7545 0.5133
 0.3296 -0.3653 7.0000 1.0000 -0.1171 5.1025 1.0000 0.0000
 5 5 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

9 ! Nr of off-diagonal terms. at1;at2;Dij;RvdW;alfa;ro(sigma);r

1	2	0.0464	1.8296	10.1311	1.0029	-1.0000	-1.0000
2	3	0.0375	1.7275	10.8037	0.8813	-1.0000	-1.0000
2	4	0.0509	1.7672	10.4261	0.9990	-1.0000	-1.0000
1	3	0.1036	1.8869	9.5668	1.3590	1.1099	1.1534
1	4	0.1971	1.7356	10.0734	1.2754	1.2113	1.1172
3	4	0.0535	1.6709	10.8180	1.2968	1.1416	1.0167
2	5	0.0464	1.8296	10.1311	1.0029	-1.0000	-1.0000
3	5	0.1036	1.8869	9.5668	1.3590	1.1099	1.1534
4	5	0.1971	1.7356	10.0734	1.2754	1.2113	1.1172

75 ! Nr of angles. at1;at2;at3;Theta0_0;ka;kb;pv1;pv2;kpenal;pv3

1	1	1	74.0317	32.2712	0.9501	0.0000	0.1780	10.5736	1.0400
1	1	2	70.6558	14.3658	5.3224	0.0000	0.0058	0.0000	1.0400
1	1	3	65.3104	6.3897	7.5000	0.0000	0.2000	10.0000	1.8525
1	1	4	65.8892	45.0000	1.6598	0.0000	0.2000	10.0000	1.8525
1	1	5	74.0317	32.2712	0.9501	0.0000	0.1780	10.5736	1.0400
2	1	2	76.7339	14.4217	3.3631	0.0000	0.0127	0.0000	1.0400
2	1	3	56.3039	17.3681	5.3095	0.0000	0.9110	0.0000	1.0400
2	1	4	71.5505	11.1820	3.7129	0.0000	0.9110	0.0000	1.0400
2	1	5	70.6558	14.3658	5.3224	0.0000	0.0058	0.0000	1.0400
3	1	3	71.9855	28.5708	6.4252	0.0000	0.2000	0.0000	1.8525
3	1	4	73.1057	25.8227	4.2145	0.0000	0.2000	0.0000	1.8525
3	1	5	65.3104	6.3897	7.5000	0.0000	0.2000	10.0000	1.8525
4	1	4	65.8759	40.9838	2.4369	0.0000	0.2000	0.0000	1.8525
4	1	5	65.8892	45.0000	1.6598	0.0000	0.2000	10.0000	1.8525
5	1	5	74.0317	32.2712	0.9501	0.0000	0.1780	10.5736	1.0400
1	2	1	0.0000	3.4110	7.7350	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
1	2	2	0.0000	0.0000	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
1	2	3	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	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	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	2	3	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
2	2	4	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
2	2	5	0.0000	0.0000	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
3	2	3	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
3	2	4	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
3	2	5	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
4	2	5	0.0000	0.0019	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
5	2	5	0.0000	3.4110	7.7350	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
1	3	1	72.3642	37.8942	1.1566	0.0000	0.7472	0.0000	1.2639
1	3	2	89.1394	37.0874	0.3849	0.0000	3.0000	0.0000	1.2618
1	3	3	90.0000	45.0000	0.5719	0.0000	0.7472	0.0000	1.2639
1	3	4	70.4313	14.4055	7.1593	0.0000	0.7472	0.0000	1.2639
1	3	5	72.3642	37.8942	1.1566	0.0000	0.7472	0.0000	1.2639
2	3	2	82.3474	13.5165	3.4896	0.0000	0.3596	0.0000	1.3307
2	3	3	80.7068	5.0854	5.7151	0.0000	3.0000	0.0000	1.2618
2	3	4	76.0238	45.0000	0.8637	0.0000	3.0000	0.0000	1.2618

2	3	5	89.1394	37.0874	0.3849	0.0000	3.0000	0.0000	1.2618	
3	3	3	83.8833	23.3345	2.3433	-10.0000	0.7472	0.0000	1.2639	
3	3	4	84.0407	45.0000	1.0695	0.0000	0.7472	0.0000	1.2639	
3	3	5	90.0000	45.0000	0.5719	0.0000	0.7472	0.0000	1.2639	
4	3	4	73.9966	24.4410	5.2760	0.0000	0.7472	0.0000	1.2639	
4	3	5	70.4313	14.4055	7.1593	0.0000	0.7472	0.0000	1.2639	
5	3	5	72.3642	37.8942	1.1566	0.0000	0.7472	0.0000	1.2639	
1	4	1	68.4330	19.3525	2.1625	0.0000	1.7325	0.0000	1.0440	
1	4	2	90.0000	32.0540	0.7195	0.0000	0.5355	0.0000	2.5279	
1	4	3	86.2893	37.5587	1.2660	0.0000	1.7325	0.0000	1.0440	
1	4	4	74.2404	12.0547	7.5000	0.0000	1.7325	0.0000	1.0440	
1	4	5	68.4330	19.3525	2.1625	0.0000	1.7325	0.0000	1.0440	
2	4	2	56.3036	14.1532	3.3914	0.0000	0.2000	0.0000	2.1689	
2	4	3	84.1185	45.0000	1.3826	0.0000	0.5355	0.0000	2.5279	
2	4	4	78.7133	24.6250	3.8202	0.0000	0.5355	0.0000	2.5279	
2	4	5	90.0000	32.0540	0.7195	0.0000	0.5355	0.0000	2.5279	
3	4	3	78.5566	43.8492	1.3351	-26.1471	1.7325	40.0000	1.0440	
3	4	4	77.4239	33.7297	1.7944	-0.9193	1.7325	0.0000	1.0440	
3	4	5	86.2893	37.5587	1.2660	0.0000	1.7325	0.0000	1.0440	
4	4	4	64.9107	17.5558	7.5000	0.0000	1.7325	0.0000	1.0440	
4	4	5	74.2404	12.0547	7.5000	0.0000	1.7325	0.0000	1.0440	
5	4	5	68.4330	19.3525	2.1625	0.0000	1.7325	0.0000	1.0440	
1	5	1	74.0317	32.2712	0.9501	0.0000	0.1780	10.5736	1.0400	
1	5	2	70.6558	14.3658	5.3224	0.0000	0.0058	0.0000	1.0400	
1	5	3	65.3104	6.3897	7.5000	0.0000	0.2000	10.0000	1.8525	
1	5	4	65.8892	45.0000	1.6598	0.0000	0.2000	10.0000	1.8525	
1	5	5	74.0317	32.2712	0.9501	0.0000	0.1780	10.5736	1.0400	
2	5	2	76.7339	14.4217	3.3631	0.0000	0.0127	0.0000	1.0400	
2	5	3	56.3039	17.3681	5.3095	0.0000	0.9110	0.0000	1.0400	
2	5	4	71.5505	11.1820	3.7129	0.0000	0.9110	0.0000	1.0400	
2	5	5	70.6558	14.3658	5.3224	0.0000	0.0058	0.0000	1.0400	
3	5	3	71.9855	28.5708	6.4252	0.0000	0.2000	0.0000	1.8525	
3	5	4	73.1057	25.8227	4.2145	0.0000	0.2000	0.0000	1.8525	
3	5	5	65.3104	6.3897	7.5000	0.0000	0.2000	10.0000	1.8525	
4	5	4	65.8759	40.9838	2.4369	0.0000	0.2000	0.0000	1.8525	
4	5	5	65.8892	45.0000	1.6598	0.0000	0.2000	10.0000	1.8525	
5	5	5	74.9085	44.7514	0.9144	0.0000	0.0050	0.3556	2.5715	
44 ! Nr of torsions. at1;at2;at3;at4;;V1;V2;V3;p(tor1);p(cot1);n										
1	1	1	1	0.0000	48.4194	0.3163	-8.6506	-1.7255	0.0000	0.0000
1	1	1	2	0.0000	63.3484	0.2210	-8.8401	-1.8081	0.0000	0.0000
1	1	1	5	0.0000	48.4194	0.3163	-8.6506	-1.7255	0.0000	0.0000
5	1	1	5	0.0000	48.4194	0.3163	-8.6506	-1.7255	0.0000	0.0000
2	1	1	2	0.0000	45.2741	0.4171	-6.9800	-1.2359	0.0000	0.0000
2	1	1	5	0.0000	63.3484	0.2210	-8.8401	-1.8081	0.0000	0.0000
0	1	1	0	0.0930	18.5962	0.0002	-9.0000	-1.0000	0.0000	0.0000
0	1	2	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	3	-0.0002	21.5452	0.1727	-9.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
3	1	3	3	-1.3476	22.4932	1.5000	-9.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
3	1	3	5	-0.0002	21.5452	0.1727	-9.0000	-2.0000	0.0000	0.0000

0	1	3	0	-0.0002	85.8794	0.3236	-3.8134	-2.0000	0.0000	0.0000
4	1	4	4	-2.0000	20.8732	-1.5000	-9.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
0	1	4	0	-0.0069	150.0000	0.4891	-7.4921	-2.0000	0.0000	0.0000
1	1	5	1	0.0000	48.4194	0.3163	-8.6506	-1.7255	0.0000	0.0000
1	1	5	2	0.0000	63.3484	0.2210	-8.8401	-1.8081	0.0000	0.0000
1	1	5	5	0.0000	48.4194	0.3163	-8.6506	-1.7255	0.0000	0.0000
2	1	5	2	0.0000	45.2741	0.4171	-6.9800	-1.2359	0.0000	0.0000
2	1	5	5	0.0000	63.3484	0.2210	-8.8401	-1.8081	0.0000	0.0000
5	1	5	5	0.0000	48.4194	0.3163	-8.6506	-1.7255	0.0000	0.0000
0	1	5	0	0.0930	18.5962	0.0002	-9.0000	-1.0000	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	2	4	0	0.0000	0.1000	0.0200	-2.5415	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	5	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	3	3	1	0.0002	79.3777	-1.5000	-5.2139	-2.0000	0.0000	0.0000
1	3	3	5	0.0002	79.3777	-1.5000	-5.2139	-2.0000	0.0000	0.0000
5	3	3	5	0.0002	79.3777	-1.5000	-5.2139	-2.0000	0.0000	0.0000
0	3	3	0	-0.9667	116.4743	0.0002	-4.9422	0.0000	0.0000	0.0000
0	3	4	0	1.6745	56.6301	-0.0008	-4.5064	-2.0000	0.0000	0.0000
1	3	5	3	-0.0002	21.5452	0.1727	-9.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
3	3	5	3	-1.3476	22.4932	1.5000	-9.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
3	3	5	5	-0.0002	21.5452	0.1727	-9.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
0	3	5	0	-0.0002	85.8794	0.3236	-3.8134	-2.0000	0.0000	0.0000
0	4	4	0	1.1253	75.3447	0.0080	-9.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
4	4	5	4	-2.0000	20.8732	-1.5000	-9.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
0	4	5	0	-0.0069	150.0000	0.4891	-7.4921	-2.0000	0.0000	0.0000
1	5	5	1	0.0000	48.4194	0.3163	-8.6506	-1.7255	0.0000	0.0000
1	5	5	2	0.0000	63.3484	0.2210	-8.8401	-1.8081	0.0000	0.0000
1	5	5	5	0.0000	48.4194	0.3163	-8.6506	-1.7255	0.0000	0.0000
2	5	5	2	0.0000	45.2741	0.4171	-6.9800	-1.2359	0.0000	0.0000
2	5	5	5	0.0000	63.3484	0.2210	-8.8401	-1.8081	0.0000	0.0000
0	5	5	0	0.0930	18.5962	0.0002	-9.0000	-1.0000	0.0000	0.0000
5	5	5	5	2.1207	26.8713	0.5160	-9.0000	-2.8394	0.0000	0.0000
4 ! Nr of hydrogen bonds. at1;at2;at3;r(hb);p(hb1);p(hb2);p(hb3)										
3	2	3		2.0000	-5.0000	3.0000	3.0000			
3	2	4		1.7753	-5.0000	3.0000	3.0000			
4	2	3		1.3884	-5.0000	3.0000	3.0000			
4	2	4		1.6953	-4.0695	3.0000	3.0000			