```
Reactive MD-force field for PVDF-ZnO piezoelectric compounds
 39       ! Number of general parameters
   50.0000 !Comment here
    9.5469 !Comment here
   26.5405 !Comment here
    1.7224 !Comment here
    6.8702 !Comment here
   60.4850 !Comment here
    1.0588 !Comment here
    4.6000 !Comment here
   12.1176 !Comment here
   13.3056 !Comment here
  -70.5044 !Comment here
    0.0000 !Comment here
   10.0000 !Comment here
    2.8793 !Comment here
   33.8667 !Comment here
    6.0891 !Comment here
    1.0563 !Comment here
    2.0384 !Comment here
    6.1431 !Comment here
    6.9290 !Comment here
    0.3989 !Comment here
    3.9954 !Comment here
   -2.4837 !Comment here
    5.7796 !Comment here
   10.0000 !Comment here
    1.9487 !Comment here
   -1.2327 !Comment here
    2.1645 !Comment here
    1.5591 !Comment here
    0.1000 !Comment here
    2.1365 !Comment here
    0.6991 !Comment here
   50.0000 !Comment here
    1.8512 !Comment here
    0.5000 !Comment here
   20.0000 !Comment here
    5.0000 !Comment here
    0.0000 !Comment here
    2.6962 !Comment here
 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.;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 202.5551   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
      0.0001   1.9255
```

```
 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
      0.0001   1.4430
 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
    623.8417   1.7500
 F    1.2100   1.0000  18.9984   1.8601   0.1200   0.3000  -0.1000
7.0000
     11.5000   7.5000   4.0000   9.2533   0.2000   9.0000  15.0000
0.0000
     -1.0000  35.0000   1.5000   6.9821   4.1799   1.0561   0.0000
0.0000
     -7.3000   2.6656   1.0493   4.0000   2.9225   0.0000   0.0000
0.0000
      0.0001   1.4600
 Zn   1.8862   2.0000  65.3900   1.9200   0.2998   0.4828  -1.6836
2.0000
     11.5134  18.3776   2.0000   0.0078   0.0000   2.0219   5.7915
0.0000
     -1.2000   0.0000 266.4838   5.3430  10.1260   0.7590   0.0000
0.0000
     -3.0614   2.1158   1.0338   6.2998   2.5791   0.0000   0.0000
0.0000
      0.0001   1.0000
 15      ! Nr of bonds; Edis1;LPpen;n.u.;pbe1;pbo5;13corr;pbo6
                        pbe2;pbo3;pbo4;n.u.;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
  1  3 158.6946 107.4583  23.3136  -0.4240  -0.1743   1.0000  10.8209
1.0000
         0.5322  -0.3113   7.0000   1.0000  -0.1447   5.2450   0.0000
0.0000
  1  4 237.8781   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  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
  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   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
  2  5   0.0000   0.0000   0.0000   0.0000  -0.5000   1.0000  50.0000
0.5000
         0.5000  -0.5000  30.0000   1.0000  -0.2000   8.0000   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
  3  4   0.0000   0.0000   0.0000   0.2500  -0.5000   1.0000  45.0000
0.6000
         0.4000  -0.2500  15.0000   1.0000  -0.1000  10.0000   1.0000
0.0000
  3  5 193.7071 107.4583  23.3136  -0.5984  -0.1743   1.0000  10.8209
0.0375
         1.7527  -0.3113   7.0000   1.0000  -0.3421   5.4933   0.0000
0.0000
  4  4 250.0765   0.0000   0.0000   0.2298  -0.3500   1.0000  25.0000
0.8427
         0.1167  -0.2500  15.0000   1.0000  -0.1506   7.3516   1.0000
0.0000
  4  5 210.5905  23.8053  17.3915  -1.7553  -0.1743   1.0000  10.8209
0.0375
         2.1662  -0.3113   7.0000   1.0000  -0.3421   5.4933   0.0000
0.0000
  5  1 181.3657   0.0000   0.0000  -0.7035  -0.5000   1.0000  36.0000
0.0082
         1.9282  -0.2500  20.0000   1.0000  -0.3467   4.6113   0.0000
0.0000
  5  5  38.4643   0.0000   0.0000  -0.6944  -0.2000   0.0000  16.0000
0.2129
         0.5059  -0.2000  15.0000   1.0000  -0.0814   6.0333   0.0000
0.0000
 9     ! 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   0.0000
  1  3   0.1156   1.8520   9.8317   1.2854   1.1352   1.0706 631.8500
  1  4   0.1071   1.6243  11.0402   1.3176  -1.0000  -1.0000   0.0000
  2  3   0.0283   1.2885  10.9190   0.9215  -1.0000  -1.0000   0.0000
  2  4   0.0431   1.7204  10.3632   0.5386  -1.0000  -1.0000   0.0000
  2  5   0.0987   1.8227  12.0654   0.1000  -1.0000  -1.0000   0.0000
  3  5   0.2744   2.1414   9.7703   1.9804  -1.0000  -1.0000   0.0000
  4  5   0.7062   2.0040   8.5188   2.2630  -1.0000  -1.0000   0.0000
  5  1   0.3226   1.8473  10.4746   2.0927  -1.0000  -1.0000   0.0000
```

```
 35    ! 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
  1  1  3  49.6811   7.1713   4.3889   0.0000   0.7171  10.2661   1.0463
  1  1  4  74.0446  35.8484   6.6125   0.0000   0.9453   0.0000   3.0000
  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  25.0000   3.0000   0.0000   1.0000   0.0000   1.0400
  1  3  1  73.5312  44.7275   0.7354   0.0000   3.0000   0.0000   1.0684
  1  3  2  70.1880  20.9562   0.3864   0.0000   0.0050   0.0000   1.6924
  1  3  3  79.4761  36.3701   1.8943   0.0000   0.7351  67.6777   3.0000
  1  4  1   0.0000  19.9962   3.2299   0.0000   2.1012   0.0000   1.1537
  1  4  4   0.0000  25.0000   1.0000   0.0000   1.0000   0.0000   1.0400
  1  5  1   9.2000  33.6674   0.6779   0.0000   4.4482   0.0000   1.9951
  1  5  3   1.4014  20.9963   0.6837   0.0000   2.8127   0.0000   1.1994
  2  1  2  70.2607  25.2202   3.7312   0.0000   0.0050   0.0000   2.7500
  2  1  3  65.0000  13.8815   5.0583   0.0000   0.4985   0.0000   1.4900
  2  2  2   0.0000  27.9213   5.8635   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  3  2  85.8000   9.8453   2.2720   0.0000   2.8635   0.0000   1.5800
  2  3  3  75.6935  50.0000   2.0000   0.0000   1.0000   0.0000   1.1680
  2  3  5  77.5446   9.9016   2.3157   0.0000   0.4543   0.0000   2.3770
  2  5  5  16.9624  30.3241   0.2697   0.0000   2.0000   0.0000   3.0708
  3  1  3  77.7473  40.1718   2.9802 -25.3063   1.6170 -46.1315   2.2503
  3  1  4  70.0000  35.0000   2.0000   0.0000   1.0000   0.0000   1.2500
  3  2  3   0.0000  15.0000   2.8900   0.0000   0.0000   0.0000   2.8774
  3  3  3  80.7324  30.4554   0.9953   0.0000   1.6310  50.0000   1.0783
  3  3  5  60.0000  20.0000   0.5000   0.0000   1.0000   0.0000   2.0000
  3  5  3  10.8790  38.9915   0.7072   0.0000   2.0000   0.0000   2.6162
  4  1  2  69.6421  10.0000   2.0000   0.0000   1.0000   0.0000   1.0400
  4  1  4  77.8443  49.0744   5.9913   0.0000   0.7835   0.0000   2.3020
  5  1  1  24.7722  13.1708   4.0600   0.0000   1.2895   0.0000   1.5387
  5  1  2  44.4071   5.6262   2.0200   0.0000   1.7000   0.0000   3.2800
  5  1  3  46.6804   6.7567   6.5645   0.0000   4.5294   0.0000   4.7480
  5  3  1  33.0175   4.4600   2.6600   0.0000   2.4000   0.0000   2.0963
  5  3  5  37.5284  32.3525   0.2657   0.0000   0.4403   0.0000   1.1000
 34    ! Nr of torsions;at1;at2;at3;at4;;V1;V2;V3;V2(BO);vconj;n.u;n
  0  1  1  0   0.0000  50.0000   0.3000  -4.0000  -2.0000   0.0000
0.0000
  0  1  2  0   0.0000   0.0000   0.0000   0.0000   0.0000   0.0000
0.0000
  0  1  4  0   4.0000  45.8264   0.9000  -4.0000   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  3  3  0   0.5511  25.4150   1.1330  -5.1903  -1.0000   0.0000
0.0000
  0  4  4  0   4.0000  45.8264   0.9000  -4.0000   0.0000   0.0000
0.0000
  1  1  1  1  -0.2500  34.7453   0.0288  -6.3507  -1.6000   0.0000
0.0000
```

```
  1  1  1  2  -0.2500  29.2131   0.2945  -4.9581  -2.1802   0.0000
0.0000
  1  1  1  3  -0.3495  22.2142  -0.2959  -2.5000  -1.9066   0.0000
0.0000
  1  1  1  4   0.5000   0.1000   0.4683 -11.5274  -1.7255   0.0000
0.0000
  1  1  3  1   1.7555  27.9267   0.0072  -2.6533  -1.0000   0.0000
0.0000
  1  1  3  2  -1.4358  36.7830  -1.0000  -8.1821  -1.0000   0.0000
0.0000
  1  1  3  3   0.6852  11.2819  -0.4784  -2.5000  -2.1085   0.0000
0.0000
  1  3  3  1   2.5000  -0.6002   1.0000  -3.4297  -2.8858   0.0000
0.0000
  1  3  3  2  -2.5000  -3.3822   0.7004  -5.4467  -2.9586   0.0000
0.0000
  1  3  3  3   1.2329  -4.0000   1.0000  -2.5000  -1.7479   0.0000
0.0000
  2  1  1  2  -0.2500  31.2081   0.4539  -4.8923  -2.2677   0.0000
0.0000
  2  1  1  3   0.0646  24.3195   0.6259  -3.9603  -1.0000   0.0000
0.0000
  2  1  1  4   0.0000  49.3871   0.2000 -10.5765  -1.7255   0.0000
0.0000
  2  1  1  5   0.0000   0.0000   0.0000   0.0000  -1.0000   0.0000
0.0000
  2  1  3  1  -1.3959  34.5053   0.7200  -2.5714  -2.1641   0.0000
0.0000
  2  1  3  2  -2.5000  70.0597   1.0000  -3.5539  -2.9929   0.0000
0.0000
  2  1  3  3   0.1933  80.0000   1.0000  -4.0590  -3.0000   0.0000
0.0000
  2  3  3  2   2.5000  -4.0000   0.9000  -2.5000  -1.0000   0.0000
0.0000
  2  3  3  3   0.8302  -4.0000  -0.7763  -2.5000  -1.0000   0.0000
0.0000
  3  1  1  3  -0.5456   5.5756   0.8433  -5.1924  -1.0180   0.0000
0.0000
  3  1  3  1  -1.9889  76.4820  -0.1796  -3.8301  -3.0000   0.0000
0.0000
  3  1  3  2   0.2160  72.7707  -0.7087  -4.2100  -3.0000   0.0000
0.0000
  3  1  3  3  -2.5000  71.0772   0.2542  -3.1631  -3.0000   0.0000
0.0000
  3  3  3  3  -2.5000  -4.0000   1.0000  -2.5000  -1.0000   0.0000
0.0000
  4  1  1  4  -0.5000  95.4727  -0.2080  -4.8579  -1.7255   0.0000
0.0000
  5  1  3  1   0.0000   0.0000   0.0000   0.0000  -1.0000   0.0000
0.0000
  5  1  3  2   0.0000   0.0000   0.0000   0.0000  -1.0000   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
```