

Reactive MD-force field: TiO2/C/N/water March 2011

```

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
-70.5044 !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/B0 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
6      ! Nr of atoms; cov.r; valency;a.m;Rvdw;Evdw;gammaEEM;cov.r2;#
      a1fa;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  202.2908  8.9539  34.9289  13.5366  0.8563  0.0000
      -2.8983  2.5000  1.0564  4.0000  2.9663  1.6737  0.1431  14.0559
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  1.2522  0.0104  12.4438
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  1.7121  0.1656  13.9991
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  1.5929  0.1636  13.9853
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  2.0012  0.1000  12.0291
X      -0.1000  2.0000  1.0080  2.0000  0.0000  1.0000  -0.1000  6.0000
      10.0000  2.5000  4.0000  0.0000  0.0000  8.5000  1.5000  0.0000
      -0.1000  0.0000  -2.3700  8.7410  13.3640  0.6690  0.9745  0.0000
      -11.0000  2.7466  1.0338  4.0000  2.8793  0.0000  0.0000  0.0000
15     ! 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
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	120.2408	0.0000	0.0000	-0.1559	-0.3000	0.0000	36.0000	0.3612	
		3.4617	-0.2934	14.0555	1.0000	-0.1718	5.3267	0.0000	0.0000	
2	5	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	5	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	5	139.9897	0.0000	0.0000	-0.2447	-0.3000	0.0000	36.0000	0.1488	
		3.8726	-0.2500	20.0000	1.0000	-0.1023	6.2547	0.0000	0.0000	
5	5	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	
10	! 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			
2	4	0.0687	1.5130	10.0094	0.9412	-1.0000	-1.0000			
1	3	0.1345	1.8422	9.7725	1.2835	1.1576	1.0637			
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			
2	5	0.1750	1.7939	13.5000	0.0100	-1.0000	-1.0000			
3	5	0.1200	1.8000	10.5000	1.6526	1.4718	-1.0000			
1	5	0.1001	1.9467	11.1261	1.9453	-1.0000	-1.0000			
4	5	0.1315	1.8167	11.1037	1.7796	-1.0000	-1.0000			
51	! 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	
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	3	65.0000	16.3141	5.2730	0.0000	0.4448	0.0000	1.4077	
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	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	
1	3	4	82.4890	31.4554	0.9953	0.0000	3.0000	0.0000	1.0783	
3	3	3	80.7324	30.4554	0.9953	0.0000	3.0000	50.0000	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	
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	4	75.6201	18.7919	0.9833	0.0000	0.1000	0.0000	1.0500	
2	3	2	85.8000	9.8453	2.2720	0.0000	2.8635	0.0000	1.5800	
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	25.0000	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	
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	
3	5	3	90.0000	30.4624	2.1468	0.0000	0.0500	0.0000	1.9485	
5	3	5	90.0000	5.7486	5.0000	0.0000	2.0000	0.0000	1.1000	
3	3	5	62.9344	15.0215	4.3743	0.0000	0.6168	0.0000	1.1673	
3	5	5	33.7127	8.0623	3.4580	0.0000	0.0500	0.0000	2.6065	
2	3	5	90.0000	9.7766	8.0000	0.0000	0.0505	0.0000	1.7257	
1	3	5	75.7312	34.8959	6.9490	0.0000	1.8293	0.0000	3.9773	
1	5	3	69.2455	15.9824	1.5873	0.0000	0.9189	0.0000	1.1195	
3	5	4	71.4297	10.5302	1.4521	0.0000	1.1031	0.0000	1.3572	
1	5	1	82.5240	18.5032	3.0278	0.0000	0.9501	0.0000	1.3920	
5	1	5	74.6269	7.4623	3.7362	0.0000	1.2576	0.0000	1.1388	
36	! Nr of torsions;at1;at2;at3;at4;V1;V2;V3;V2(B0);vconj;n;u;n									
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
2	1	1	2	-0.2500	31.2081	0.4539	-4.8923	-2.2677	0.0000	0.0000

1	1	1	3	1.2799	20.7787	-0.5249	-2.5000	-1.0000	0.0000	0.0000
2	1	1	3	1.9159	19.8113	0.7914	-4.6995	-1.0000	0.0000	0.0000
3	1	1	3	-1.4477	16.6853	0.6461	-4.9622	-1.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	1	0.4816	19.6316	-0.0057	-2.5000	-1.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	2	1.2044	80.0000	-0.3139	-6.1481	-1.0000	0.0000	0.0000
2	1	3	1	-2.5000	31.0191	0.6165	-2.7733	-2.9807	0.0000	0.0000
2	1	3	2	-2.4875	70.8145	0.7582	-4.2274	-3.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	3	-0.3566	10.0000	0.0816	-2.6110	-1.9631	0.0000	0.0000
2	1	3	3	-1.4383	80.0000	1.0000	-3.6877	-2.8000	0.0000	0.0000
3	1	3	1	-1.1390	78.0747	-0.0964	-4.5172	-3.0000	0.0000	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	-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
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	1	3	5	0.0000	84.3556	0.1000	-3.1953	0.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	5	0.0000	51.0461	0.1059	-7.2043	0.0000	0.0000	0.0000
2	3	5	3	-0.2500	0.0100	-0.5000	-4.6984	0.0000	0.0000	0.0000
4	! 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			