

```

C Zinc
*** ZN      Zn      -4  0  2.0000
***  ZN      Zn      -4  0  2.0000
*** Zn      Zn      -4  0  2.0000
***  Zn      Zn      -4  0  2.0000
*
C Calcium
*** CAL     Ca      -4  0  2.0000
***  CAL     Ca      -4  0  2.0000
*** CA      Ca      -4  0  2.0000
***  CA      Ca      -4  0  2.0000
*** Ca      Ca      -4  0  2.0000
***  Ca      Ca      -4  0  2.0000
*
C Barium (as Ca)
*** BA      Ca      -4  0  2.0000
***  BA      Ca      -4  0  2.0000
*** Ba      Ca      -4  0  2.0000
***  Ba      Ca      -4  0  2.0000
*
C Sr (as Ca)
*** SR      Ca      -4  0  2.0000
***  SR      Ca      -4  0  2.0000
*** Sr      Ca      -4  0  2.0000
***  Sr      Ca      -4  0  2.0000
*
C Sodium
*** NA      Na      -6  0  1.0000
***  NA      Na      -6  0  1.0000
*** Na      Na      -6  0  1.0000
***  Na      Na      -6  0  1.0000
*
C Iron
*** FE      Fe      -6  0  3.0000
***  FE      Fe      -6  0  3.0000
*** Fe      Fe      -6  0  3.0000
***  Fe      Fe      -6  0  3.0000
*
C Chlorine
! *** CL     CL_B    -6  0  -1.0000
! *** CL     CL_B    -6  0  -1.0000
C Titanium
*** TI      Ti      -6  0  4.0000
***  TI      Ti      -6  0  4.0000
*** Ti      Ti      -6  0  4.0000
***  Ti      Ti      -6  0  4.0000
*
C La (as Ti)
*** LA      Ti      -6  0  4.0000
***  LA      Ti      -6  0  4.0000
*** La      Ti      -6  0  4.0000
***  La      Ti      -6  0  4.0000
*
C Ruthenium
*** RU      Ru      -6  0  3.0000

```

```
*** RU      Ru      -6  0  3.0000
*** Ru      Ru      -6  0  3.0000
*** Ru      Ru      -6  0  3.0000
*
C Yittrium (as Ru)
*** Y_      Ru      -6  0  3.0000
*** Y_      Ru      -6  0  3.0000
*
*
C Bromine conversion to Dreiding atom type
BR BR      Br      1  0
*
```