

# Nitromethane

atom	FF	charge	sigma	epsilon
C	CGenFF	0.0380	0.36527	0.32635
	OPLS 1.14*CM1A	-0.1803	0.35000	0.27614
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	-0.1803	0.35000	0.27614
	GAFF	-0.1024	0.33997	0.45773
	GAFF2	-0.1024	0.33977	0.45104
N	CGenFF	0.2720	0.32963	0.83680
	OPLS 1.14*CM1A	0.7045	0.32500	0.50208
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	0.3445	0.32500	0.50208
	GAFF	0.2343	0.32500	0.71128
	GAFF2	0.2343	0.33651	0.35899
O1	CGenFF	-0.2900	0.30291	0.50208
	OPLS 1.14*CM1A	-0.4654	0.29600	0.71128
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	-0.2854	0.29600	0.71128
	GAFF	-0.2090	0.29599	0.87864
	GAFF2	-0.2090	0.30481	0.61212
O2	CGenFF	-0.2900	0.30291	0.50208
	OPLS 1.14*CM1A	-0.4654	0.29600	0.71128
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	-0.2854	0.29600	0.71128
	GAFF	-0.2090	0.29599	0.87864
	GAFF2	-0.2090	0.30481	0.61212
H1	CGenFF	0.0900	0.23876	0.10042
	OPLS 1.14*CM1A	0.1355	0.25000	0.12552
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	0.1355	0.25000	0.12552
	GAFF	0.0954	0.24714	0.06569
	GAFF2	0.0954	0.24220	0.08703
H2	CGenFF	0.0900	0.23876	0.10042
	OPLS 1.14*CM1A	0.1355	0.25000	0.12552
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	0.1355	0.25000	0.12552
	GAFF	0.0954	0.24714	0.06569
	GAFF2	0.0954	0.24220	0.08703
H3	CGenFF	0.0900	0.23876	0.10042
	OPLS 1.14*CM1A	0.1355	0.25000	0.12552
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	0.1355	0.25000	0.12552
	GAFF	0.0954	0.24714	0.06569
	GAFF2	0.0954	0.24220	0.08703

## Acetic acid

atom	FF	charge	sigma	epsilon
O1(OH)	CGenFF	-0.5950	0.31449	0.80375
	OPLS 1.14*CM1A	-0.5116	0.31200	0.71128
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	-0.5116	0.31200	0.71128
	GAFF	-0.6121	0.30665	0.88031
	GAFF2	-0.6111	0.32429	0.38911
H1(HO)	CGenFF	0.4300	0.04000	0.19246
	OPLS 1.14*CM1A	0.4243	0.00000	0.00000
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	0.4243	0.00000	0.00000
	GAFF	0.4440	0.00000	0.00000
	GAFF2	0.4440	0.05379	0.01966
O2(C=O)	CGenFF	-0.5610	0.30291	0.50208
	OPLS 1.14*CM1A	-0.4629	0.29600	0.87864
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	-0.5129	0.29600	0.87864
	GAFF	-0.5500	0.29599	0.87864
	GAFF2	-0.5520	0.30481	0.61212
C1(C=O)	CGenFF	0.7510	0.30291	0.41003
	OPLS 1.14*CM1A	0.4377	0.35500	0.29288
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	0.4877	0.35500	0.29288
	GAFF	0.6341	0.33997	0.35982
	GAFF2	0.6361	0.33152	0.41338
C2(CH3)	CGenFF	-0.2950	0.36527	0.32635
	OPLS 1.14*CM1A	-0.2170	0.35000	0.27614
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	-0.2170	0.35000	0.27614
	GAFF	-0.1491	0.33997	0.45773
	GAFF2	-0.1501	0.33977	0.45104
H2	CGenFF	0.0900	0.23876	0.10042
	OPLS 1.14*CM1A	0.1099	0.25000	0.12552
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	0.1099	0.25000	0.12552
	GAFF	0.0777	0.00000	0.00000
	GAFF2	0.0777	0.26002	0.08703
H3	CGenFF	0.0900	0.23876	0.10042
	OPLS 1.14*CM1A	0.1099	0.25000	0.12552
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	0.1099	0.25000	0.12552
	GAFF	0.0777	0.00000	0.00000
	GAFF2	0.0777	0.26002	0.08703
H4	CGenFF	0.0900	0.23876	0.10042
	OPLS 1.14*CM1A	0.1099	0.25000	0.12552
	OPLS 1.14*CM1A-LBCC	0.1099	0.25000	0.12552
	GAFF	0.0777	0.00000	0.00000
	GAFF2	0.0777	0.26002	0.08703