

**First Principles Calculation of a Large Variation  
in Dielectric Tensor Through the Spin Crossover  
in the CsFe[Cr(CN)<sub>6</sub>] Prussian Blue Analogue**

**Derek S. Middlemiss and Robert J. Deeth**

**Supplementary Material**

## I. Computational methods and theory of dielectric response

The exchange-correlation functionals, basis sets, effective core pseudopotentials, reciprocal space sampling meshes, DFT quadrature grids and Coulomb and exchange integral series truncation tolerances are the same as in the previous LCAO study of CsFe[Cr(CN)<sub>6</sub>] [1], save that only two Becke-LYP hybrid functionals are used here, bearing admixtures  $F_0 = 14\%$  and  $20\%$  of Hartree-Fock exchange. The numerical parameters adopted in the present study are all more accurate than those used previously, with geometry optimization convergence tolerances of  $5 \times 10^{-6}$ ,  $7.5 \times 10^{-6}$ ,  $2 \times 10^{-5}$ ,  $3 \times 10^{-5}$  and  $10^{-10}$  AU for RMS force, maximum force, RMS displacement, maximum displacement, and energy change, and an SCF energy convergence tolerance of  $10^{-11}$  AU.

The normal modes and vibrational frequencies of the lattices are obtained within a finite displacement approach [2,3], using both positive and negative atomic displacements of size  $\pm 0.005 \text{ \AA}$  along the Cartesian axes so as to remove the leading anharmonic contribution to the force constants. Lattice symmetry is used to assist in filling the mass-weighted Hessian matrix. The dynamical charge tensors [4] are computed within a Wannier-Boys localization approach [5] and are normalized to fulfill the sum rule. The clamped nuclei dielectric tensors are efficiently obtained by solution of the coupled-perturbed Kohn-Sham/Hartree-Fock (CPKS/HF) equations in the primitive crystal cells [6-8].

Model dielectric functions for the high spin (HS) and low spin (LS) states are derived as follows. The oscillator strength associated with the  $n^{\text{th}}$  normal vibrational mode of the lattice is obtained as

$$f_{\text{nij}} = \frac{4\pi}{\Omega} \frac{\bar{Z}_{\text{ni}} \bar{Z}_{\text{nj}}}{\nu_n^2}, \quad (1)$$

where  $i$  and  $j$  label Cartesian axes,  $\Omega$  is the unit cell volume,  $\nu_n$  is the mode frequency, and

$$\bar{Z}_{ni} = \sum_{Aj} t_{nAj} Z_{Aij} \frac{1}{\sqrt{M_A}}, \quad (2)$$

is the mode effective charge. Here  $t$  is an element of the eigenvectors matrix  $\mathbf{T}$  of the mass-weighted Hessian matrix  $\mathbf{W}$  transforming the Cartesian axes into the set of normal mode coordinates characteristic of the structure;  $\mathbf{Z}$  is the second-rank dynamical charge tensor associated with atom  $A$  in the cell; and  $M_A$  is the mass of atom  $A$ . Here  $\mathbf{Z}$  is defined as

$$Z_{Aij} = \Omega \left. \frac{\partial P_i}{\partial u_{Aj}} \right|_{\mathbf{E}=\mathbf{0}}, \quad (3)$$

where  $\mathbf{P}$  is the cell polarization vector obtained by computation of the Wannier functions [5],  $\mathbf{u}_A$  is an atomic displacement vector, and the derivative is evaluated at zero applied electric field ( $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ ). The HS lattice is tetragonal, and the LS lattice is cubic, leading in both cases to diagonal clamped nuclei  $\epsilon_{ii}^\infty$  and frequency dependent  $\epsilon_{ii}(\nu)$  dielectric tensors, the latter defined in a damped harmonic oscillator approach [4,9,10] as a sum over polar modes

$$\epsilon_{ii}(\nu) = \epsilon_{ii}^\infty + \sum_n \frac{f_{nii} \nu_n^2}{\nu_n^2 - \nu^2 - i\nu\gamma_n}. \quad (4)$$

The static ( $\nu = 0$ ) dielectric tensor  $\epsilon_{ii}^0$  is then straightforwardly obtained as the sum  $\epsilon_{ii}^0 = \epsilon_{ii}^\infty + \sum_n f_{nii} = \epsilon_{ii}^\infty + \epsilon_{ii}^{\text{phon}}$  of the clamped nuclei component with the sum of the oscillator strengths of the polar phonons active along the corresponding crystal axis.

## II. Optimized structures (lattice constants and fractional atomic coordinates)

### Experimental

Volume(LS, 180K)=275.58Å<sup>3</sup>, Volume(HS, 280K)=306.95Å<sup>3</sup> [11]

#### F<sub>0</sub>=14%, LS

Volume=281.4702Å<sup>3</sup>, Density=2.341g/cm<sup>3</sup>

a=7.3561Å, b=7.3561Å, c=7.3561Å, α=60.0000°, β=60.0000°, γ=60.0000°

Cs	2.49999999997E-01	2.500000000001E-01	2.500000000001E-01
N	1.882471536086E-01	-1.882471536086E-01	-1.882471536086E-01
N	-1.882471536086E-01	1.882471536086E-01	1.882471536086E-01
N	-1.882471536086E-01	1.882471536086E-01	-1.882471536086E-01
N	-1.882471536086E-01	-1.882471536086E-01	1.882471536086E-01
N	1.882471536086E-01	-1.882471536086E-01	1.882471536086E-01
N	1.882471536086E-01	1.882471536086E-01	-1.882471536086E-01
C	2.998292683292E-01	-2.998292683292E-01	-2.998292683292E-01
C	-2.998292683292E-01	2.998292683292E-01	2.998292683292E-01
C	-2.998292683292E-01	2.998292683292E-01	-2.998292683292E-01
C	-2.998292683292E-01	-2.998292683292E-01	2.998292683292E-01
C	2.998292683292E-01	-2.998292683292E-01	2.998292683292E-01
C	2.998292683292E-01	2.998292683292E-01	-2.998292683292E-01
Cr	-4.99999999999E-01	-4.99999999999E-01	-4.99999999999E-01
Fe	0.00000000000E+00	0.00000000000E+00	0.00000000000E+00

#### F<sub>0</sub>=14%, HS

Volume=317.5092Å<sup>3</sup>, Density=2.075g/cm<sup>3</sup>

a=7.6594Å, b=7.6594Å, c=7.6540Å, α=60.0234°, β=60.0234°, γ=59.9532°

Cs	2.49999999998E-01	2.49999999998E-01	2.500000000002E-01
N	-2.006913683154E-01	2.006913683154E-01	2.006913683154E-01
N	2.006913683154E-01	-2.006913683154E-01	-2.006913683154E-01
N	2.006913683154E-01	-2.006913683154E-01	2.006913683154E-01
N	-2.006913683154E-01	2.006913683154E-01	-2.006913683154E-01
N	2.008562397168E-01	2.008562397168E-01	-2.008562397168E-01
N	-2.008562397168E-01	-2.008562397168E-01	2.008562397168E-01
C	-3.080069067117E-01	3.080069067117E-01	3.080069067117E-01
C	3.080069067117E-01	-3.080069067117E-01	-3.080069067117E-01
C	3.080069067117E-01	-3.080069067117E-01	3.080069067117E-01
C	-3.080069067117E-01	3.080069067117E-01	-3.080069067117E-01
C	3.079465408702E-01	3.079465408702E-01	-3.079465408702E-01
C	-3.079465408702E-01	-3.079465408702E-01	3.079465408702E-01
Cr	4.99999999997E-01	4.99999999997E-01	-4.99999999997E-01
Fe	0.00000000000E+00	0.00000000000E+00	0.00000000000E+00

#### F<sub>0</sub>=20%, LS

Volume=283.5639Å<sup>3</sup>, Density=2.324g/cm<sup>3</sup>

a=7.3743Å, b=7.3743Å, c=7.3743Å, α=60.0000°, β=60.0000°, γ=60.0000°

Cs	2.500000000000E-01	2.500000000000E-01	2.500000000000E-01
N	1.888769239260E-01	-1.888769239260E-01	-1.888769239260E-01
N	-1.888769239260E-01	1.888769239260E-01	1.888769239260E-01

N -1.888769239260E-01 1.888769239260E-01 -1.888769239260E-01  
 N -1.888769239260E-01 -1.888769239260E-01 1.888769239260E-01  
 N 1.888769239260E-01 -1.888769239260E-01 1.888769239260E-01  
 N 1.888769239260E-01 1.888769239260E-01 -1.888769239260E-01  
 C 2.998137401974E-01 -2.998137401974E-01 -2.998137401974E-01  
 C -2.998137401974E-01 2.998137401974E-01 2.998137401974E-01  
 C -2.998137401974E-01 2.998137401974E-01 -2.998137401974E-01  
 C -2.998137401974E-01 -2.998137401974E-01 2.998137401974E-01  
 C 2.998137401974E-01 -2.998137401974E-01 2.998137401974E-01  
 C 2.998137401974E-01 2.998137401974E-01 -2.998137401974E-01  
 Cr -4.999999999999E-01 -4.999999999999E-01 -4.999999999999E-01  
 Fe 0.000000000000E+00 0.000000000000E+00 0.000000000000E+00

**F<sub>0</sub>=20%, HS**

Volume=318.7572Å<sup>3</sup>, Density=2.067g/cm<sup>3</sup>

a=7.6679Å, b=7.6679Å, c=7.6669Å, α=60.0047°, β=60.0047°, γ=59.9907°

Cs 2.499999999999E-01 2.499999999999E-01 2.499999999997E-01  
 N -2.010474259116E-01 2.010474259116E-01 2.010474259116E-01  
 N 2.010474259116E-01 -2.010474259116E-01 -2.010474259116E-01  
 N 2.010474259116E-01 -2.010474259116E-01 2.010474259116E-01  
 N -2.010474259116E-01 2.010474259116E-01 -2.010474259116E-01  
 N 2.009349795530E-01 2.009349795530E-01 -2.009349795530E-01  
 N -2.009349795530E-01 -2.009349795530E-01 2.009349795530E-01  
 C -3.078519268707E-01 3.078519268707E-01 3.078519268707E-01  
 C 3.078519268707E-01 -3.078519268707E-01 -3.078519268707E-01  
 C 3.078519268707E-01 -3.078519268707E-01 3.078519268707E-01  
 C -3.078519268707E-01 3.078519268707E-01 -3.078519268707E-01  
 C 3.076518459493E-01 3.076518459493E-01 -3.076518459493E-01  
 C -3.076518459493E-01 -3.076518459493E-01 3.076518459493E-01  
 Cr 4.999999999997E-01 4.999999999997E-01 -4.999999999998E-01  
 Fe 0.000000000000E+00 0.000000000000E+00 0.000000000000E+00

### III. Mode frequencies and oscillator strengths

(Irrep = irreducible representation, act = activity, A = active, I = inactive, IR intensity in km/mol, f = oscillator strength). Lowest three modes are of acoustic type in each case.

#### $F_0=14\%$ , LS

Modes	$\nu(\text{cm}^{-1})$	Irrep	IR act	IR intensity	Raman act.	$f_{xx}/f_{yy}/f_{zz}$
1-3	-0.0182	F <sub>2</sub>	A	0	A	
4-6	62.3315	F <sub>2</sub>	A	39.24	A	0.60365
7-9	97.2736	F <sub>1</sub>	I	0	I	
10-12	244.6579	F <sub>1</sub>	I	0	I	
13-15	254.8124	F <sub>2</sub>	A	90.45	A	0.08327
16-18	290.5191	F <sub>2</sub>	A	0.43	A	0.00031
19-21	321.6789	F <sub>2</sub>	A	3.78	A	0.00218
22-24	339.6815	F <sub>1</sub>	I	0	I	
25-27	441.1971	F <sub>1</sub>	I	0	I	
28-29	449.3671	E	I	0	A	
30-32	466.6297	F <sub>2</sub>	A	0.71	A	0.00019
33-33	469.8072	A	I	0	A	
34-36	493.8362	F <sub>2</sub>	A	413.33	A	0.10131
37-39	502.0744	F <sub>2</sub>	A	20.02	A	0.00475
40-42	2220.8171	F <sub>2</sub>	A	203.84	A	0.00247
43-44	2223.0141	E	I	0	A	
45-45	2235.6953	A	I	0	A	

#### $F_0=14\%$ , HS

Modes	$\nu(\text{cm}^{-1})$	Irrep	IR act	IR intensity	Raman act.	$f_{xx}/f_{yy}$	$f_{zz}$
1-2	-0.0513	E	A	0	A		
3-3	-0.0202	B <sub>2</sub>	A	0	A		
4-4	38.2932	B <sub>2</sub>	A	14.14	A		1.53343
5-6	41.4048	E	A	27.5	A	1.27516	
7-8	51.1272	E	A	0.14	A	0.00413	
9-9	64.2956	A <sub>2</sub>	I	0	I		
10-10	144.5258	A <sub>2</sub>	I	0	I		
11-12	162.1745	E	A	20.56	A	0.06212	
13-14	206.8032	E	A	42.44	A	0.07888	
15-15	209.2012	B <sub>2</sub>	A	177.46	A		0.64461
16-17	222.0593	E	A	3.69	A	0.00595	
18-18	227.8371	B <sub>2</sub>	A	5.14	A		0.01573
19-19	232.0636	B <sub>2</sub>	A	3.28	A		0.00968
20-21	243.8673	E	A	115.16	A	0.15392	
22-23	297.0082	E	A	0	A	0.00000	
24-24	302.9606	A <sub>2</sub>	I	0	I		
25-25	368.8888	A <sub>2</sub>	I	0	I		
26-27	373.3195	E	A	138.07	A	0.07875	
28-28	375.9482	B <sub>2</sub>	A	230.53	A		0.25929
29-29	376.8266	B <sub>1</sub>	I	0	A		
30-30	378.4318	A <sub>1</sub>	I	0	A		
31-32	386.5251	E	A	172.56	A	0.09181	
33-34	412.7499	E	A	1.14	A	0.00053	
35-35	419.2734	B <sub>2</sub>	A	0.58	A		0.00052

36-36	432.6505	A <sub>1</sub>	I	0	A	
37-37	470.6345	B <sub>2</sub>	A	124.48	A	0.08934
38-39	474.6081	E	A	237.76	A	0.08390
40-41	2216.3824	E	A	5.39	A	0.00009
42-42	2217.1684	B <sub>1</sub>	I	0	A	
43-43	2220.4547	A <sub>1</sub>	I	0	A	
44-44	2230.4774	B <sub>2</sub>	A	169.61	A	0.00542
45-45	2233.3734	A <sub>1</sub>	I	0	A	

### F<sub>0</sub>=20%, LS

Modes	$\nu(\text{cm}^{-1})$	Irrep	IR act	IR intensity	Raman act.	$f_{xx}/f_{yy}/f_{zz}$
1-3	-0.0188	F <sub>2</sub>	A	0	A	
4-6	60.7028	F <sub>2</sub>	A	39.04	A	0.62866
7-9	95.0565	F <sub>1</sub>	I	0	I	
10-12	242.9696	F <sub>1</sub>	I	0	I	
13-15	256.4149	F <sub>2</sub>	A	55.04	A	0.04967
16-18	288.1261	F <sub>2</sub>	A	0.35	A	0.00025
19-21	319.136	F <sub>2</sub>	A	5.7	A	0.00332
22-24	339.7593	F <sub>1</sub>	I	0	I	
25-27	439.7948	F <sub>1</sub>	I	0	I	
28-29	443.8943	E	I	0	A	
30-30	464.5302	A	I	0	A	
31-33	465.9372	F <sub>2</sub>	A	0.2	A	0.00005
34-36	491.895	F <sub>2</sub>	A	408.18	A	0.10009
37-39	501.1116	F <sub>2</sub>	A	103.38	A	0.02443
40-42	2259.5728	F <sub>2</sub>	A	58.98	A	0.00069
43-44	2260.8826	E	I	0	A	
45-45	2270.3923	A	I	0	A	

### F<sub>0</sub>=20%, HS

Modes	$\nu(\text{cm}^{-1})$	Irrep	IR act	IR intensity	Raman act.	$f_{xx}/f_{yy}$	$f_{zz}$
1-2	-0.038	E	A	0	A		
3-3	-0.0271	B <sub>2</sub>	A	0	A		
4-4	37.5883	B <sub>2</sub>	A	14.18	A		1.58926
5-6	40.3402	E	A	27.69	A	1.34718	
7-8	50.9334	E	A	0.09	A	0.00265	
9-9	58.4681	A <sub>2</sub>	I	0	I		
10-10	146.1019	A <sub>2</sub>	I	0	I		
11-12	163.2097	E	A	18.89	A	0.05615	
13-14	209.1879	E	A	58.82	A	0.10642	
15-15	210.7847	B <sub>2</sub>	A	169.62	A		0.60453
16-17	221.8904	E	A	6.76	A	0.01088	
18-18	227.9556	B <sub>2</sub>	A	7.45	A		0.02271
19-19	230.4933	B <sub>2</sub>	A	0.24	A		0.00071
20-21	242.8041	E	A	116.37	A	0.15629	
22-23	298.2462	E	A	0	A	0.00000	
24-24	302.3354	A <sub>2</sub>	I	0	I		
25-25	370.7831	A <sub>2</sub>	I	0	I		
26-27	375.0434	E	A	146.29	A	0.08234	
28-28	376.2037	B <sub>1</sub>	I	0	A		
29-29	377.874	B <sub>2</sub>	A	224.21	A		0.24864
30-30	378.5995	A <sub>1</sub>	I	0	A		
31-32	385.8305	E	A	187.73	A	0.09984	

33-34	414.6257	E	A	0.87	A	0.00040
35-35	419.3233	B <sub>2</sub>	A	0.48	A	0.00043
36-36	434.2402	A <sub>1</sub>	I	0	A	
37-37	474.7088	B <sub>2</sub>	A	133.39	A	0.09373
38-39	477.7186	E	A	236.24	A	0.08196
40-41	2251.5747	E	A	32.73	A	0.00051
42-42	2251.6297	B <sub>1</sub>	I	0	A	
43-43	2254.5591	A <sub>1</sub>	I	0	A	
44-44	2262.4461	B <sub>2</sub>	A	151.79	A	0.00470
45-45	2265.0409	A <sub>1</sub>	I	0	A	



#### IV. Scalar dynamical charges

(ax = axial, eq = equatorial). All values in  $|e|$ .

**F<sub>0</sub>=14%**      HS      Cs +1.090, N<sub>eq</sub> -0.614, N<sub>ax</sub> -0.912, C<sub>eq</sub> -0.253, C<sub>ax</sub> -0.043

Cr +1.809, Fe +2.479

LS      Cs +1.095, N -0.121, C -0.419, Cr +2.207, Fe -0.062

**F<sub>0</sub>=20%**      HS      Cs +1.089, N<sub>eq</sub> -0.673, N<sub>ax</sub> -0.900, C<sub>eq</sub> -0.211, C<sub>ax</sub> -0.060

Cr +1.794, Fe +2.573

LS      Cs +1.094, N -0.240, C -0.357, Cr +2.112, Fe +0.377

## V. Vibrational mode eigenvectors (normalized to classical amplitudes)

$F_0=14\%$ , LS

$\nu(\text{cm}^{-1})$		-0.02	-0.02	-0.02	62.33	62.33	62.33
Cs	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	0.0982	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0982	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	0.0982
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0519	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0484	0.0000	-0.0046
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0046	0.0000	-0.0484
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0519	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0484	0.0000	0.0046
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0046	0.0000	-0.0484
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0484	-0.0046
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0519	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0046	-0.0484
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0046	-0.0484	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0484	-0.0046	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0519
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0484	0.0046
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0519	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0046	-0.0484
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0046	-0.0484	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0484	0.0046	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0519
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0519	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0452	0.0000	-0.0077
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0077	0.0000	-0.0452
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0519	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0452	0.0000	0.0077
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0077	0.0000	-0.0452
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0452	-0.0077
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0519	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0077	-0.0452
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0077	-0.0452	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0452	-0.0077	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0519
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0452	0.0077
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0519	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0077	-0.0452
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0077	-0.0452	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0452	0.0077	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0519
Cr	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0499	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0499	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0499
Fe	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0514	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0514	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0514
$\nu(\text{cm}^{-1})$		97.27	97.27	97.27	244.66	244.66	244.66
Cs	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.1107	0.0000	0.0055	0.0065	0.0000	0.0612
	z	-0.0055	0.0000	0.1107	-0.0612	0.0000	-0.0065
N	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.1107	0.0000	0.0055	-0.0065	0.0000	0.0612
	z	-0.0055	0.0000	-0.1107	-0.0612	0.0000	0.0065
N	x	0.1107	-0.0055	0.0000	-0.0065	-0.0612	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0055	-0.1107	0.0000	0.0612	0.0065	0.0000
N	x	0.0000	0.0055	-0.1107	0.0000	0.0612	0.0065
	y	0.0000	0.1107	-0.0055	0.0000	-0.0065	-0.0612
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	-0.1107	-0.0055	0.0000	0.0065	-0.0612	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0055	0.1107	0.0000	0.0612	-0.0065	0.0000
N	x	0.0000	0.0055	0.1107	0.0000	0.0612	-0.0065
	y	0.0000	-0.1107	-0.0055	0.0000	0.0065	-0.0612
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

C	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.1066	0.0000	0.0088	0.0021	0.0000	0.0764
	z	-0.0088	0.0000	0.1066	-0.0764	0.0000	-0.0021
C	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.1066	0.0000	0.0088	-0.0021	0.0000	0.0764
	z	-0.0088	0.0000	-0.1066	-0.0764	0.0000	0.0021
C	x	0.1066	-0.0088	0.0000	-0.0021	-0.0764	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0088	-0.1066	0.0000	0.0764	0.0021	0.0000
C	x	0.0000	0.0088	-0.1066	0.0000	0.0764	0.0021
	y	0.0000	0.1066	-0.0088	0.0000	-0.0021	-0.0764
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	-0.1066	-0.0088	0.0000	0.0021	-0.0764	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0088	0.1066	0.0000	0.0764	-0.0021	0.0000
C	x	0.0000	0.0088	0.1066	0.0000	0.0764	-0.0021
	y	0.0000	-0.1066	-0.0088	0.0000	0.0021	-0.0764
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Cr	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
<b><math>\nu(\text{cm}^{-1})</math></b>		<b>254.81</b>	<b>254.81</b>	<b>254.81</b>	<b>290.52</b>	<b>290.52</b>	<b>290.52</b>
Cs	x	0.0003	0.0000	0.0000	0.0017	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0003	0.0000	0.0000	0.0017	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0003	0.0000	0.0000	0.0017
N	x	-0.0089	0.0000	0.0000	-0.0115	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0363	-0.0007	0.0000	0.0074	0.0563
	z	0.0000	-0.0007	0.0363	0.0000	0.0563	0.0074
N	x	-0.0089	0.0000	0.0000	-0.0115	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0363	0.0007	0.0000	0.0074	-0.0563
	z	0.0000	0.0007	0.0363	0.0000	-0.0563	0.0074
N	x	0.0363	0.0000	-0.0007	0.0074	0.0000	0.0563
	y	0.0000	-0.0089	0.0000	0.0000	-0.0115	0.0000
	z	-0.0007	0.0000	0.0363	0.0563	0.0000	0.0074
N	x	0.0363	-0.0007	0.0000	0.0074	0.0563	0.0000
	y	-0.0007	0.0363	0.0000	0.0563	0.0074	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0089	0.0000	0.0000	-0.0115
N	x	0.0363	0.0000	0.0007	0.0074	0.0000	-0.0563
	y	0.0000	-0.0089	0.0000	0.0000	-0.0115	0.0000
	z	0.0007	0.0000	0.0363	-0.0563	0.0000	0.0074
N	x	0.0363	0.0007	0.0000	0.0074	-0.0563	0.0000
	y	0.0007	0.0363	0.0000	-0.0563	0.0074	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0089	0.0000	0.0000	-0.0115
C	x	-0.0117	0.0000	0.0000	-0.0115	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0266	-0.0007	0.0000	0.0158	0.0660
	z	0.0000	-0.0007	-0.0266	0.0000	0.0660	0.0158
C	x	-0.0117	0.0000	0.0000	-0.0115	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0266	0.0007	0.0000	0.0158	-0.0660
	z	0.0000	0.0007	-0.0266	0.0000	-0.0660	0.0158
C	x	-0.0266	0.0000	-0.0007	0.0158	0.0000	0.0660
	y	0.0000	-0.0117	0.0000	0.0000	-0.0115	0.0000
	z	-0.0007	0.0000	-0.0266	0.0660	0.0000	0.0158
C	x	-0.0266	-0.0007	0.0000	0.0158	0.0660	0.0000
	y	-0.0007	-0.0266	0.0000	0.0660	0.0158	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0117	0.0000	0.0000	-0.0115
C	x	-0.0266	0.0000	0.0007	0.0158	0.0000	-0.0660
	y	0.0000	-0.0117	0.0000	0.0000	-0.0115	0.0000
	z	0.0007	0.0000	-0.0266	-0.0660	0.0000	0.0158
C	x	-0.0266	0.0007	0.0000	0.0158	-0.0660	0.0000
	y	0.0007	-0.0266	0.0000	-0.0660	0.0158	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0117	0.0000	0.0000	-0.0115
Cr	x	-0.0624	0.0000	0.0000	-0.0076	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0624	0.0000	0.0000	-0.0076	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0624	0.0000	0.0000	-0.0076
Fe	x	0.0530	0.0000	0.0000	-0.0072	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0530	0.0000	0.0000	-0.0072	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0530	0.0000	0.0000	-0.0072
<b><math>\nu(\text{cm}^{-1})</math></b>		<b>321.68</b>	<b>321.68</b>	<b>321.68</b>	<b>339.68</b>	<b>339.68</b>	<b>339.68</b>
Cs	x	-0.0016	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

	y	0.0000	-0.0016	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0016	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	-0.0390	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0306	-0.0153	-0.0528	0.0000	0.0021
	z	0.0000	-0.0153	0.0306	-0.0021	0.0000	0.0528
N	x	-0.0390	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0306	0.0153	0.0528	0.0000	0.0021
	z	0.0000	0.0153	0.0306	-0.0021	0.0000	-0.0528
N	x	0.0306	0.0000	-0.0153	0.0528	-0.0021	0.0000
	y	0.0000	-0.0390	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0153	0.0000	0.0306	0.0021	-0.0528	0.0000
N	x	0.0306	-0.0153	0.0000	0.0000	0.0021	-0.0528
	y	-0.0153	0.0306	0.0000	0.0000	0.0528	-0.0021
	z	0.0000	0.0000	-0.0390	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0306	0.0000	0.0153	-0.0528	-0.0021	0.0000
	y	0.0000	-0.0390	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0153	0.0000	0.0306	0.0021	0.0528	0.0000
N	x	0.0306	0.0153	0.0000	0.0000	0.0021	0.0528
	y	0.0153	0.0306	0.0000	0.0000	-0.0528	-0.0021
	z	0.0000	0.0000	-0.0390	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0591	-0.0155	0.0642	0.0000	0.0015
	z	0.0000	-0.0155	0.0591	-0.0015	0.0000	-0.0642
C	x	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0591	0.0155	-0.0642	0.0000	0.0015
	z	0.0000	0.0155	0.0591	-0.0015	0.0000	0.0642
C	x	0.0591	0.0000	-0.0155	-0.0642	-0.0015	0.0000
	y	0.0000	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0155	0.0000	0.0591	0.0015	0.0642	0.0000
C	x	0.0591	-0.0155	0.0000	0.0000	0.0015	0.0642
	y	-0.0155	0.0591	0.0000	0.0000	-0.0642	-0.0015
	z	0.0000	0.0000	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0591	0.0000	0.0155	0.0642	-0.0015	0.0000
	y	0.0000	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0155	0.0000	0.0591	0.0015	-0.0642	0.0000
C	x	0.0591	0.0155	0.0000	0.0000	0.0015	-0.0642
	y	0.0155	0.0591	0.0000	0.0000	0.0642	-0.0015
	z	0.0000	0.0000	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000
Cr	x	-0.0190	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0190	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0190	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	-0.0237	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0237	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0237	0.0000	0.0000	0.0000
<b><math>\nu(\text{cm}^{-1})</math></b>		<b>441.20</b>	<b>441.20</b>	<b>441.20</b>	<b>449.37</b>	<b>449.37</b>	<b>466.63</b>
Cs	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0003
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0510	-0.0294	-0.0024
	y	0.0000	0.0000	0.0528	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0528	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0510	0.0294	-0.0024
	y	0.0000	0.0000	0.0528	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0528	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	-0.0528	0.0000	0.0000	0.0000	0.0053
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0510	-0.0294	0.0000
	z	0.0528	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0495
N	x	0.0000	0.0528	0.0000	0.0000	0.0000	0.0053
	y	0.0000	0.0000	-0.0528	0.0000	0.0000	0.0495
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0589	0.0000
N	x	0.0000	-0.0528	0.0000	0.0000	0.0000	0.0053
	y	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0510	0.0294	0.0000
	z	0.0528	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0495
N	x	0.0000	0.0528	0.0000	0.0000	0.0000	0.0053
	y	0.0000	0.0000	-0.0528	0.0000	0.0000	-0.0495
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0589	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0505	-0.0291	-0.0023
	y	-0.0009	0.0000	-0.0493	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0493	0.0000	0.0009	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0505	0.0291	-0.0023
	y	0.0009	0.0000	-0.0493	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0493	0.0000	-0.0009	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0009	0.0493	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0031

	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0505	-0.0291	0.0000
	z	-0.0493	-0.0009	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0496
C	x	0.0000	-0.0493	-0.0009	0.0000	0.0000	-0.0031
	y	0.0000	0.0009	0.0493	0.0000	0.0000	-0.0496
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0583	0.0000
C	x	-0.0009	0.0493	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0031
	y	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0505	0.0291	0.0000
	z	-0.0493	0.0009	0.0000	0.0000	0.0000	0.0496
C	x	0.0000	-0.0493	0.0009	0.0000	0.0000	-0.0031
	y	0.0000	-0.0009	0.0493	0.0000	0.0000	0.0496
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0583	0.0000
Cr	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0028
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0023
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>466.63</b>	<b>466.63</b>	<b>469.81</b>	<b>493.84</b>	<b>493.84</b>	<b>493.84</b>
Cs	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	-0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0406	0.0515	0.0000	0.0000
	y	0.0053	0.0495	0.0000	0.0000	0.0035	0.0012
	z	0.0495	0.0053	0.0000	0.0000	0.0012	0.0035
N	x	0.0000	0.0000	-0.0406	0.0515	0.0000	0.0000
	y	0.0053	-0.0495	0.0000	0.0000	0.0035	-0.0012
	z	-0.0495	0.0053	0.0000	0.0000	-0.0012	0.0035
N	x	0.0000	0.0000	0.0406	0.0000	0.0035	0.0012
	y	-0.0024	0.0000	0.0000	0.0000	0.0515	0.0000
	z	0.0000	0.0053	0.0000	0.0012	0.0000	0.0035
N	x	0.0495	0.0000	0.0000	0.0035	0.0012	0.0000
	y	0.0053	0.0000	0.0000	0.0012	0.0035	0.0000
	z	0.0000	-0.0024	0.0406	0.0000	0.0000	0.0515
N	x	0.0000	-0.0495	0.0000	0.0035	0.0000	-0.0012
	y	-0.0024	0.0000	-0.0406	0.0000	0.0515	0.0000
	z	0.0000	0.0053	0.0000	-0.0012	0.0000	0.0035
N	x	-0.0495	0.0000	0.0000	0.0035	-0.0012	0.0000
	y	0.0053	0.0000	0.0000	-0.0012	0.0035	0.0000
	z	0.0000	-0.0024	-0.0406	0.0000	0.0000	0.0515
C	x	0.0000	0.0000	0.0405	0.0505	0.0000	0.0000
	y	-0.0031	-0.0496	0.0000	0.0000	0.0095	-0.0020
	z	-0.0496	-0.0031	0.0000	0.0000	-0.0020	0.0095
C	x	0.0000	0.0000	-0.0405	0.0505	0.0000	0.0000
	y	-0.0031	0.0496	0.0000	0.0000	0.0095	0.0020
	z	0.0496	-0.0031	0.0000	0.0000	0.0020	0.0095
C	x	0.0000	-0.0496	0.0000	0.0095	0.0000	-0.0020
	y	-0.0023	0.0000	0.0405	0.0000	0.0505	0.0000
	z	0.0000	-0.0031	0.0000	-0.0020	0.0000	0.0095
C	x	-0.0496	0.0000	0.0000	0.0095	-0.0020	0.0000
	y	-0.0031	0.0000	0.0000	-0.0020	0.0095	0.0000
	z	0.0000	-0.0023	0.0405	0.0000	0.0000	0.0505
C	x	0.0000	0.0496	0.0000	0.0095	0.0000	0.0020
	y	-0.0023	0.0000	-0.0405	0.0000	0.0505	0.0000
	z	0.0000	-0.0031	0.0000	0.0020	0.0000	0.0095
C	x	0.0496	0.0000	0.0000	0.0095	0.0020	0.0000
	y	-0.0031	0.0000	0.0000	0.0020	0.0095	0.0000
	z	0.0000	-0.0023	-0.0405	0.0000	0.0000	0.0505
Cr	x	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0346	0.0000	0.0000
	y	0.0028	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0346	0.0000
	z	0.0000	0.0028	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0346
Fe	x	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0270	0.0000	0.0000
	y	-0.0023	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0270	0.0000
	z	0.0000	-0.0023	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0270

<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>502.07</b>	<b>502.07</b>	<b>502.07</b>	<b>2220.82</b>	<b>2220.82</b>	<b>2220.82</b>
Cs	x	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0018	0.0000	-0.0297	0.0000	0.0000
	y	-0.0452	0.0000	0.0045	0.0000	0.0002	0.0000
	z	0.0045	0.0000	-0.0452	0.0000	0.0000	0.0002
N	x	0.0000	0.0018	0.0000	-0.0297	0.0000	0.0000
	y	-0.0452	0.0000	-0.0045	0.0000	0.0002	0.0000

N	z	-0.0045	0.0000	-0.0452	0.0000	0.0000	0.0002
	x	0.0000	-0.0452	0.0045	0.0002	0.0000	0.0000
	y	0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0297
N	z	0.0000	0.0045	-0.0452	0.0000	0.0000	0.0002
	x	0.0045	-0.0452	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	-0.0452	0.0045	0.0000	0.0000	0.0002	0.0000
N	z	0.0000	0.0000	0.0018	0.0000	0.0000	-0.0297
	x	0.0000	-0.0452	-0.0045	0.0002	0.0000	0.0000
	y	0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0297	0.0000
N	z	0.0000	-0.0045	-0.0452	0.0000	0.0000	0.0002
	x	-0.0045	-0.0452	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	-0.0452	-0.0045	0.0000	0.0000	0.0002	0.0000
C	z	0.0000	0.0000	0.0018	0.0000	0.0000	-0.0297
	x	0.0000	0.0018	0.0000	0.0350	0.0000	0.0000
	y	0.0360	0.0000	-0.0053	0.0000	-0.0001	0.0000
C	z	-0.0053	0.0000	0.0360	0.0000	0.0000	-0.0001
	x	0.0000	0.0018	0.0000	0.0350	0.0000	0.0000
	y	0.0360	0.0000	0.0053	0.0000	-0.0001	0.0000
C	z	0.0053	0.0000	0.0360	0.0000	0.0000	-0.0001
	x	0.0000	0.0360	-0.0053	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	0.0350	0.0000
C	z	0.0000	-0.0053	0.0360	0.0000	0.0000	-0.0001
	x	-0.0053	0.0360	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0360	-0.0053	0.0000	0.0000	-0.0001	0.0000
C	z	0.0000	0.0000	0.0018	0.0000	0.0000	0.0350
	x	0.0000	0.0360	0.0053	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	0.0350	0.0000
C	z	0.0000	0.0053	0.0360	0.0000	0.0000	-0.0001
	x	0.0053	0.0360	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0360	0.0053	0.0000	0.0000	-0.0001	0.0000
Cr	z	0.0000	0.0000	0.0018	0.0000	0.0000	0.0350
	x	0.0000	-0.0167	0.0000	-0.0004	0.0000	0.0000
	y	-0.0167	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0004	0.0000
Fe	z	0.0000	0.0000	-0.0167	0.0000	0.0000	-0.0004
	x	0.0000	0.0286	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	0.0286	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0286	0.0000	0.0000	0.0002

$\nu(\text{cm}^{-1})$		2223.01	2223.01	2235.70
Cs	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0210	0.0121	-0.0172
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	-0.0210	-0.0121	0.0172
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.0210	0.0121	-0.0172
	z	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	-0.0243	-0.0172
N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0210	-0.0121	0.0172
	z	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0243	0.0172
C	x	-0.0248	-0.0143	0.0201
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0248	0.0143	-0.0201
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0248	-0.0143	0.0201
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0286	0.0201
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.0248	0.0143	-0.0201

C	z	0.0000	0.0000	0.0000
	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
Cr	z	0.0000	-0.0286	-0.0201
	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	z	0.0000	0.0000	0.0000
	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000

### F<sub>0</sub>=14%, HS

$\nu(\text{cm}^{-1})$		<b>-0.05</b>	<b>-0.05</b>	<b>-0.02</b>	<b>38.29</b>	<b>41.40</b>	<b>41.40</b>
Cs	x	2.4319	0.0000	0.0000	0.0000	0.1205	0.0000
	y	0.0000	2.4319	0.0000	0.0000	0.0000	0.1205
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.1254	0.0000	0.0000
N	x	2.4323	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0617	0.0000
	y	0.0000	2.4325	0.0000	0.0008	0.0000	-0.0612
	z	0.0000	0.0028	0.0502	-0.0656	0.0000	-0.0091
N	x	2.4323	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0617	0.0000
	y	0.0000	2.4325	0.0000	-0.0008	0.0000	-0.0612
	z	0.0000	-0.0028	0.0502	-0.0656	0.0000	0.0091
N	x	2.4325	0.0000	0.0000	0.0008	-0.0612	0.0000
	y	0.0000	2.4323	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0617
	z	0.0028	0.0000	0.0502	-0.0656	-0.0091	0.0000
N	x	2.4325	0.0000	0.0000	-0.0008	-0.0612	0.0000
	y	0.0000	2.4323	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0617
	z	-0.0028	0.0000	0.0502	-0.0656	0.0091	0.0000
N	x	2.4327	-0.0005	0.0000	0.0000	-0.0634	0.0090
	y	-0.0005	2.4327	0.0000	0.0000	0.0090	-0.0634
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0641	0.0000	0.0000
N	x	2.4327	0.0005	0.0000	0.0000	-0.0634	-0.0090
	y	0.0005	2.4327	0.0000	0.0000	-0.0090	-0.0634
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0641	0.0000	0.0000
C	x	2.4323	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0617	0.0000
	y	0.0000	2.4323	0.0000	0.0048	0.0000	-0.0571
	z	0.0000	0.0015	0.0502	-0.0603	0.0000	-0.0027
C	x	2.4323	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0617	0.0000
	y	0.0000	2.4323	0.0000	-0.0048	0.0000	-0.0571
	z	0.0000	-0.0015	0.0502	-0.0603	0.0000	0.0027
C	x	2.4323	0.0000	0.0000	0.0048	-0.0571	0.0000
	y	0.0000	2.4323	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0617
	z	0.0015	0.0000	0.0502	-0.0603	-0.0027	0.0000
C	x	2.4323	0.0000	0.0000	-0.0048	-0.0571	0.0000
	y	0.0000	2.4323	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0617
	z	-0.0015	0.0000	0.0502	-0.0603	0.0027	0.0000
C	x	2.4323	-0.0009	0.0000	0.0000	-0.0584	0.0117
	y	-0.0009	2.4323	0.0000	0.0000	0.0117	-0.0584
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0640	0.0000	0.0000
C	x	2.4323	0.0009	0.0000	0.0000	-0.0584	-0.0117
	y	0.0009	2.4323	0.0000	0.0000	-0.0117	-0.0584
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0640	0.0000	0.0000
Cr	x	2.4323	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0598	0.0000
	y	0.0000	2.4323	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0598
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0619	0.0000	0.0000
Fe	x	2.4320	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0613	0.0000
	y	0.0000	2.4320	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0613
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0635	0.0000	0.0000
<b><math>\nu(\text{cm}^{-1})</math></b>							
Cs	x	<b>-0.0053</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0004</b>	<b>0.0000</b>
	y	<b>0.0000</b>	<b>-0.0053</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0004</b>
	z	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>
N	x	<b>0.0026</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>-0.0035</b>	<b>0.0000</b>
	y	<b>0.0000</b>	<b>-0.0007</b>	<b>-0.1470</b>	<b>-0.0001</b>	<b>0.0000</b>	<b>-0.0769</b>
	z	<b>0.0000</b>	<b>-0.1699</b>	<b>-0.0067</b>	<b>-0.1059</b>	<b>0.0000</b>	<b>-0.0025</b>
N	x	<b>0.0026</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>-0.0035</b>	<b>0.0000</b>
	y	<b>0.0000</b>	<b>-0.0007</b>	<b>0.1470</b>	<b>0.0001</b>	<b>0.0000</b>	<b>-0.0769</b>
	z	<b>0.0000</b>	<b>0.1699</b>	<b>-0.0067</b>	<b>-0.1059</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0025</b>
N	x	<b>-0.0007</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.1470</b>	<b>0.0001</b>	<b>-0.0769</b>	<b>0.0000</b>
	y	<b>0.0000</b>	<b>0.0026</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>0.0000</b>	<b>-0.0035</b>

	z	-0.1699	0.0000	0.0067	0.1059	-0.0025	0.0000
N	x	-0.0007	0.0000	-0.1470	-0.0001	-0.0769	0.0000
	y	0.0000	0.0026	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0035
	z	0.1699	0.0000	0.0067	0.1059	0.0025	0.0000
N	x	0.0078	0.1655	0.0000	0.0000	0.1127	0.0011
	y	0.1655	0.0078	0.0000	0.0000	0.0011	0.1127
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0078	-0.1655	0.0000	0.0000	0.1127	-0.0011
	y	-0.1655	0.0078	0.0000	0.0000	-0.0011	0.1127
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0026	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0035	0.0000
	y	0.0000	0.0050	-0.1172	0.0069	0.0000	-0.0531
	z	0.0000	-0.1280	0.0006	-0.0650	0.0000	0.0046
C	x	0.0026	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0035	0.0000
	y	0.0000	0.0050	0.1172	-0.0069	0.0000	-0.0531
	z	0.0000	0.1280	0.0006	-0.0650	0.0000	-0.0046
C	x	0.0050	0.0000	0.1172	-0.0069	-0.0531	0.0000
	y	0.0000	0.0026	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0035
	z	-0.1280	0.0000	-0.0006	0.0650	0.0046	0.0000
C	x	0.0050	0.0000	-0.1172	0.0069	-0.0531	0.0000
	y	0.0000	0.0026	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0035
	z	0.1280	0.0000	-0.0006	0.0650	-0.0046	0.0000
C	x	0.0004	0.1257	0.0000	0.0000	0.0722	-0.0066
	y	0.1257	0.0004	0.0000	0.0000	-0.0066	0.0722
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0004	-0.1257	0.0000	0.0000	0.0722	0.0066
	y	-0.1257	0.0004	0.0000	0.0000	0.0066	0.0722
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Cr	x	0.0025	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0025	0.0000
	y	0.0000	0.0025	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0025
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0022	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0214	0.0000
	y	0.0000	0.0022	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0214
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>206.80</b>	<b>206.80</b>	<b>209.20</b>	<b>222.06</b>	<b>222.06</b>	<b>227.84</b>
Cs	x	0.0004	0.0000	0.0000	-0.0006	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0004	0.0000	0.0000	-0.0006	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000	-0.0004
N	x	-0.0164	0.0000	0.0000	0.0059	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0011	0.0071	0.0000	-0.0036	-0.0191
	z	0.0000	0.0150	-0.0392	0.0000	0.0832	-0.0651
N	x	-0.0164	0.0000	0.0000	0.0059	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0011	-0.0071	0.0000	-0.0036	0.0191
	z	0.0000	-0.0150	-0.0392	0.0000	-0.0832	-0.0651
N	x	-0.0011	0.0000	0.0071	-0.0036	0.0000	-0.0191
	y	0.0000	-0.0164	0.0000	0.0000	0.0059	0.0000
	z	0.0150	0.0000	-0.0392	0.0832	0.0000	-0.0651
N	x	-0.0011	0.0000	-0.0071	-0.0036	0.0000	0.0191
	y	0.0000	-0.0164	0.0000	0.0000	0.0059	0.0000
	z	-0.0150	0.0000	-0.0392	-0.0832	0.0000	-0.0651
N	x	0.0234	0.0160	0.0000	-0.0045	0.0838	0.0000
	y	0.0160	0.0234	0.0000	0.0838	-0.0045	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0073	0.0000	0.0000	0.0316
N	x	0.0234	-0.0160	0.0000	-0.0045	-0.0838	0.0000
	y	-0.0160	0.0234	0.0000	-0.0838	-0.0045	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0073	0.0000	0.0000	0.0316
C	x	-0.0184	0.0000	0.0000	0.0062	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0459	0.0063	0.0000	0.0033	-0.0109
	z	0.0000	0.0100	-0.0459	0.0000	0.0510	0.0040
C	x	-0.0184	0.0000	0.0000	0.0062	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0459	-0.0063	0.0000	0.0033	0.0109
	z	0.0000	-0.0100	-0.0459	0.0000	-0.0510	0.0040
C	x	-0.0459	0.0000	0.0063	0.0033	0.0000	-0.0109
	y	0.0000	-0.0184	0.0000	0.0000	0.0062	0.0000
	z	0.0100	0.0000	-0.0459	0.0510	0.0000	0.0040
C	x	-0.0459	0.0000	-0.0063	0.0033	0.0000	0.0109
	y	0.0000	-0.0184	0.0000	0.0000	0.0062	0.0000
	z	-0.0100	0.0000	-0.0459	-0.0510	0.0000	0.0040
C	x	-0.0277	0.0092	0.0000	0.0024	0.0542	0.0000
	y	0.0092	-0.0277	0.0000	0.0542	0.0024	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0059	0.0000	0.0000	0.0338
C	x	-0.0277	-0.0092	0.0000	0.0024	-0.0542	0.0000
	y	-0.0092	-0.0277	0.0000	-0.0542	0.0024	0.0000



	z	0.0000	0.0000	0.0059	0.0000	0.0000	0.0338
Cr	x	-0.0468	0.0000	0.0000	0.0109	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0468	0.0000	0.0000	0.0109	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0104	0.0000	0.0000	0.0590
Fe	x	0.0791	0.0000	0.0000	-0.0128	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0791	0.0000	0.0000	-0.0128	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0819	0.0000	0.0000	-0.0224
<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>232.06</b>	<b>243.87</b>	<b>243.87</b>	<b>297.01</b>	<b>297.01</b>	<b>302.96</b>
Cs	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0007	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	-0.0314	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	0.0792	0.0000	0.0812	0.0000	-0.0029	0.0500
	z	-0.0098	0.0000	0.0062	0.0000	0.0481	-0.0020
N	x	0.0000	-0.0314	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	-0.0792	0.0000	0.0812	0.0000	-0.0029	-0.0500
	z	-0.0098	0.0000	-0.0062	0.0000	-0.0481	-0.0020
N	x	0.0792	0.0812	0.0000	-0.0029	0.0000	-0.0500
	y	0.0000	0.0000	-0.0314	0.0000	0.0002	0.0000
	z	-0.0098	0.0062	0.0000	0.0481	0.0000	0.0020
N	x	-0.0792	0.0812	0.0000	-0.0029	0.0000	0.0500
	y	0.0000	0.0000	-0.0314	0.0000	0.0002	0.0000
	z	-0.0098	-0.0062	0.0000	-0.0481	0.0000	0.0020
N	x	0.0000	0.0552	0.0042	0.0027	-0.0494	0.0000
	y	0.0000	0.0042	0.0552	-0.0494	0.0027	0.0000
	z	0.0082	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0552	-0.0042	0.0027	0.0494	0.0000
	y	0.0000	-0.0042	0.0552	0.0494	0.0027	0.0000
	z	0.0082	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	-0.0323	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	0.0534	0.0000	0.0447	0.0000	-0.0038	-0.0731
	z	0.0027	0.0000	-0.0004	0.0000	-0.0759	-0.0041
C	x	0.0000	-0.0323	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	-0.0534	0.0000	0.0447	0.0000	-0.0038	0.0731
	z	0.0027	0.0000	0.0004	0.0000	0.0759	-0.0041
C	x	0.0534	0.0447	0.0000	-0.0038	0.0000	0.0731
	y	0.0000	0.0000	-0.0323	0.0000	0.0002	0.0000
	z	0.0027	-0.0004	0.0000	-0.0759	0.0000	0.0041
C	x	-0.0534	0.0447	0.0000	-0.0038	0.0000	-0.0731
	y	0.0000	0.0000	-0.0323	0.0000	0.0002	0.0000
	z	0.0027	0.0004	0.0000	0.0759	0.0000	0.0041
C	x	0.0000	0.0101	0.0018	0.0033	0.0744	0.0000
	y	0.0000	0.0018	0.0101	0.0744	0.0033	0.0000
	z	0.0088	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0101	-0.0018	0.0033	-0.0744	0.0000
	y	0.0000	-0.0018	0.0101	-0.0744	0.0033	0.0000
	z	0.0088	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Cr	x	0.0000	-0.0404	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	-0.0404	0.0000	0.0001	0.0000
	z	0.0151	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0000	-0.0247	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	-0.0247	0.0000	0.0001	0.0000
	z	-0.0127	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>368.89</b>	<b>373.32</b>	<b>373.32</b>	<b>375.95</b>	<b>376.83</b>	<b>378.43</b>
Cs	x	0.0000	0.0000	-0.0004	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0004	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0005	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	-0.0319	0.0000	-0.0561	-0.0337
	y	-0.0025	0.0125	0.0000	0.0035	0.0000	0.0000
	z	0.0377	0.0015	0.0000	-0.0233	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	-0.0319	0.0000	0.0561	0.0337
	y	0.0025	0.0125	0.0000	-0.0035	0.0000	0.0000
	z	0.0377	-0.0015	0.0000	-0.0233	0.0000	0.0000
N	x	0.0025	0.0000	0.0125	0.0035	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0319	0.0000	0.0000	0.0561	-0.0337
	z	-0.0377	0.0000	0.0015	-0.0233	0.0000	0.0000
N	x	-0.0025	0.0000	0.0125	-0.0035	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0319	0.0000	0.0000	-0.0561	0.0337
	z	-0.0377	0.0000	-0.0015	-0.0233	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0044	-0.0445	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0445	0.0044	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0495	0.0000	0.0632

N	x	0.0000	-0.0044	-0.0445	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0445	-0.0044	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0495	0.0000	-0.0632
C	x	0.0000	0.0000	-0.0311	0.0000	-0.0546	-0.0328
	y	0.0008	-0.0139	0.0000	-0.0015	0.0000	0.0000
	z	-0.0716	-0.0022	0.0000	0.0544	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	-0.0311	0.0000	0.0546	0.0328
	y	-0.0008	-0.0139	0.0000	0.0015	0.0000	0.0000
	z	-0.0716	0.0022	0.0000	0.0544	0.0000	0.0000
C	x	-0.0008	0.0000	-0.0139	-0.0015	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0311	0.0000	0.0000	0.0546	-0.0328
	z	0.0716	0.0000	-0.0022	0.0544	0.0000	0.0000
C	x	0.0008	0.0000	-0.0139	0.0015	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0311	0.0000	0.0000	-0.0546	0.0328
	z	0.0716	0.0000	0.0022	0.0544	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	-0.0022	0.0909	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0909	-0.0022	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0485	0.0000	0.0617
C	x	0.0000	0.0022	0.0909	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0909	0.0022	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0485	0.0000	-0.0617
Cr	x	0.0000	0.0000	0.0021	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0021	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0047	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0000	0.0000	0.0112	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0112	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0191	0.0000	0.0000
<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>386.53</b>	<b>386.53</b>	<b>412.75</b>	<b>412.75</b>	<b>419.27</b>	<b>432.65</b>
Cs	x	-0.0003	0.0000	0.0006	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0003	0.0000	0.0006	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0005	0.0000
N	x	-0.0355	0.0000	0.0046	0.0000	0.0000	0.0417
	y	0.0000	-0.0502	0.0000	-0.0011	-0.0376	0.0000
	z	0.0000	0.0037	0.0000	0.0359	0.0014	0.0000
N	x	-0.0355	0.0000	0.0046	0.0000	0.0000	-0.0417
	y	0.0000	-0.0502	0.0000	-0.0011	0.0376	0.0000
	z	0.0000	-0.0037	0.0000	-0.0359	0.0014	0.0000
N	x	-0.0502	0.0000	-0.0011	0.0000	-0.0376	0.0000
	y	0.0000	-0.0355	0.0000	0.0046	0.0000	0.0417
	z	0.0037	0.0000	0.0359	0.0000	0.0014	0.0000
N	x	-0.0502	0.0000	-0.0011	0.0000	0.0376	0.0000
	y	0.0000	-0.0355	0.0000	0.0046	0.0000	-0.0417
	z	-0.0037	0.0000	-0.0359	0.0000	0.0014	0.0000
N	x	0.0065	0.0013	-0.0007	0.0363	0.0000	0.0000
	y	0.0013	0.0065	0.0363	-0.0007	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0039	0.0442
N	x	0.0065	-0.0013	-0.0007	-0.0363	0.0000	0.0000
	y	-0.0013	0.0065	-0.0363	-0.0007	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0039	-0.0442
C	x	-0.0343	0.0000	0.0044	0.0000	0.0000	0.0409
	y	0.0000	0.0809	0.0000	-0.0018	0.0656	0.0000
	z	0.0000	-0.0022	0.0000	-0.0671	0.0011	0.0000
C	x	-0.0343	0.0000	0.0044	0.0000	0.0000	-0.0409
	y	0.0000	0.0809	0.0000	-0.0018	-0.0656	0.0000
	z	0.0000	0.0022	0.0000	0.0671	0.0011	0.0000
C	x	0.0809	0.0000	-0.0018	0.0000	0.0656	0.0000
	y	0.0000	-0.0343	0.0000	0.0044	0.0000	0.0409
	z	-0.0022	0.0000	-0.0671	0.0000	0.0011	0.0000
C	x	0.0809	0.0000	-0.0018	0.0000	-0.0656	0.0000
	y	0.0000	-0.0343	0.0000	0.0044	0.0000	-0.0409
	z	0.0022	0.0000	0.0671	0.0000	0.0011	0.0000
C	x	-0.0072	-0.0019	-0.0028	-0.0674	0.0000	0.0000
	y	-0.0019	-0.0072	-0.0674	-0.0028	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0038	0.0437
C	x	-0.0072	0.0019	-0.0028	0.0674	0.0000	0.0000
	y	0.0019	-0.0072	0.0674	-0.0028	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0038	-0.0437
Cr	x	0.0088	0.0000	-0.0019	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0088	0.0000	-0.0019	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0020	0.0000
Fe	x	0.0152	0.0000	-0.0010	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0152	0.0000	-0.0010	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0007	0.0000

<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>470.63</b>	<b>474.61</b>	<b>474.61</b>	<b>2216.38</b>	<b>2216.38</b>	<b>2217.17</b>
Cs	x	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0387	0.0000	-0.0296	0.0000	0.0208
	y	-0.0010	0.0000	-0.0223	0.0000	0.0001	0.0000
	z	-0.0188	0.0000	-0.0008	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0387	0.0000	-0.0296	0.0000	-0.0208
	y	0.0010	0.0000	-0.0223	0.0000	0.0001	0.0000
	z	-0.0188	0.0000	0.0008	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	-0.0010	-0.0223	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0387	0.0000	-0.0296	-0.0208
	z	-0.0188	-0.0008	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0010	-0.0223	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0387	0.0000	-0.0296	0.0208
	z	-0.0188	0.0008	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	-0.0177	-0.0009	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0009	-0.0177	0.0000	0.0001	0.0000
	z	0.0388	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	-0.0177	0.0009	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0009	-0.0177	0.0000	0.0001	0.0000
	z	0.0388	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0370	0.0000	0.0352	0.0000	-0.0250
	y	0.0031	0.0000	0.0351	0.0000	-0.0001	0.0000
	z	0.0327	0.0000	0.0028	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0370	0.0000	0.0352	0.0000	0.0250
	y	-0.0031	0.0000	0.0351	0.0000	-0.0001	0.0000
	z	0.0327	0.0000	-0.0028	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0031	0.0351	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0370	0.0000	0.0352	0.0250
	z	0.0327	0.0028	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	-0.0031	0.0351	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0370	0.0000	0.0352	-0.0250
	z	0.0327	-0.0028	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0301	0.0029	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0029	0.0301	0.0000	-0.0001	0.0000
	z	0.0368	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0301	-0.0029	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0029	0.0301	0.0000	-0.0001	0.0000
	z	0.0368	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Cr	x	0.0000	-0.0448	0.0000	-0.0005	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	-0.0448	0.0000	-0.0005	0.0000
	z	-0.0459	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0000	-0.0013	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	-0.0013	0.0000	0.0001	0.0000
	z	-0.0017	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>2220.45</b>	<b>2230.48</b>	<b>2233.37</b>			
Cs	x	0.0000	0.0000	0.0000			
	y	0.0000	0.0000	0.0000			
	z	0.0000	0.0000	0.0000			
N	x	-0.0206	0.0000	-0.0035			
	y	0.0000	0.0000	0.0000			
	z	0.0000	0.0001	0.0000			
N	x	0.0206	0.0000	0.0035			
	y	0.0000	0.0000	0.0000			
	z	0.0000	0.0001	0.0000			
N	x	0.0000	0.0000	0.0000			
	y	-0.0206	0.0000	-0.0035			
	z	0.0000	0.0001	0.0000			
N	x	0.0000	0.0000	0.0000			
	y	0.0206	0.0000	0.0035			
	z	0.0000	0.0001	0.0000			
N	x	0.0000	0.0000	0.0000			
	y	0.0000	0.0000	0.0000			
	z	0.0048	-0.0296	-0.0291			
N	x	0.0000	0.0000	0.0000			
	y	0.0000	0.0000	0.0000			
	z	-0.0048	-0.0296	0.0291			
C	x	0.0246	0.0000	0.0040			
	y	0.0000	0.0000	0.0000			
	z	0.0000	0.0000	0.0000			
C	x	-0.0246	0.0000	-0.0040			

	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0246	0.0000	0.0040
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.0246	0.0000	-0.0040
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0058	0.0351	0.0346
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0058	0.0351	-0.0346
Cr	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	-0.0005	0.0000
Fe	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0002	0.0000

### F<sub>0</sub>=20%, LS

<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>-0.02</b>	<b>-0.02</b>	<b>-0.02</b>	<b>60.70</b>	<b>60.70</b>	<b>60.70</b>
Cs	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	0.0995	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0995	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	0.0995
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0525	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0492	0.0000	-0.0044
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0044	0.0000	-0.0492
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0525	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0492	0.0000	0.0044
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0044	0.0000	-0.0492
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0492	-0.0044
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0525	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0044	-0.0492
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0044	-0.0492	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0492	-0.0044	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0525
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0492	0.0044
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0525	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0044	-0.0492
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0044	-0.0492	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0492	0.0044	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0525
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0524	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0460	0.0000	-0.0074
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0074	0.0000	-0.0460
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0524	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0460	0.0000	0.0074
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0074	0.0000	-0.0460
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0460	-0.0074
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0524	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0074	-0.0460
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0074	-0.0460	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0460	-0.0074	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0524
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0460	0.0074
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0524	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0074	-0.0460
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0074	-0.0460	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0460	0.0074	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0524
Cr	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0505	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0505	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0505
Fe	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0520	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0520	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0520
<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>95.06</b>	<b>95.06</b>	<b>95.06</b>	<b>242.97</b>	<b>242.97</b>	<b>242.97</b>
Cs	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.1125	0.0000	0.0051	0.0062	0.0000	0.0625
	z	-0.0051	0.0000	0.1125	-0.0625	0.0000	-0.0062
N	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.1125	0.0000	0.0051	-0.0062	0.0000	0.0625
	z	-0.0051	0.0000	-0.1125	-0.0625	0.0000	0.0062
N	x	0.1125	-0.0051	0.0000	-0.0062	-0.0625	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0051	-0.1125	0.0000	0.0625	0.0062	0.0000
N	x	0.0000	0.0051	-0.1125	0.0000	0.0625	0.0062
	y	0.0000	0.1125	-0.0051	0.0000	-0.0062	-0.0625
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	-0.1125	-0.0051	0.0000	0.0062	-0.0625	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0051	0.1125	0.0000	0.0625	-0.0062	0.0000
N	x	0.0000	0.0051	0.1125	0.0000	0.0625	-0.0062
	y	0.0000	-0.1125	-0.0051	0.0000	0.0062	-0.0625
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.1074	0.0000	0.0083	0.0017	0.0000	0.0756
	z	-0.0083	0.0000	0.1074	-0.0756	0.0000	-0.0017
C	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.1074	0.0000	0.0083	-0.0017	0.0000	0.0756
	z	-0.0083	0.0000	-0.1074	-0.0756	0.0000	0.0017
C	x	0.1074	-0.0083	0.0000	-0.0017	-0.0756	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0083	-0.1074	0.0000	0.0756	0.0017	0.0000
C	x	0.0000	0.0083	-0.1074	0.0000	0.0756	0.0017
	y	0.0000	0.1074	-0.0083	0.0000	-0.0017	-0.0756
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	-0.1074	-0.0083	0.0000	0.0017	-0.0756	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0083	0.1074	0.0000	0.0756	-0.0017	0.0000
C	x	0.0000	0.0083	0.1074	0.0000	0.0756	-0.0017
	y	0.0000	-0.1074	-0.0083	0.0000	0.0017	-0.0756
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Cr	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>256.41</b>	<b>256.41</b>	<b>256.41</b>	<b>288.13</b>	<b>288.13</b>	<b>288.13</b>
Cs	x	0.0003	0.0000	0.0000	0.0016	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0003	0.0000	0.0000	0.0016	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0003	0.0000	0.0000	0.0016
N	x	-0.0096	0.0000	0.0000	-0.0111	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0368	-0.0010	0.0000	0.0075	0.0578
	z	0.0000	-0.0010	0.0368	0.0000	0.0578	0.0075
N	x	-0.0096	0.0000	0.0000	-0.0111	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0368	0.0010	0.0000	0.0075	-0.0578
	z	0.0000	0.0010	0.0368	0.0000	-0.0578	0.0075
N	x	0.0368	0.0000	-0.0010	0.0075	0.0000	0.0578
	y	0.0000	-0.0096	0.0000	0.0000	-0.0111	0.0000
	z	-0.0010	0.0000	0.0368	0.0578	0.0000	0.0075
N	x	0.0368	-0.0010	0.0000	0.0075	0.0578	0.0000
	y	-0.0010	0.0368	0.0000	0.0578	0.0075	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0096	0.0000	0.0000	-0.0111
N	x	0.0368	0.0000	0.0010	0.0075	0.0000	-0.0578
	y	0.0000	-0.0096	0.0000	0.0000	-0.0111	0.0000
	z	0.0010	0.0000	0.0368	-0.0578	0.0000	0.0075
N	x	0.0368	0.0010	0.0000	0.0075	-0.0578	0.0000
	y	0.0010	0.0368	0.0000	-0.0578	0.0075	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0096	0.0000	0.0000	-0.0111
C	x	-0.0127	0.0000	0.0000	-0.0111	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0269	-0.0010	0.0000	0.0148	0.0654
	z	0.0000	-0.0010	-0.0269	0.0000	0.0654	0.0148
C	x	-0.0127	0.0000	0.0000	-0.0111	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0269	0.0010	0.0000	0.0148	-0.0654
	z	0.0000	0.0010	-0.0269	0.0000	-0.0654	0.0148
C	x	-0.0269	0.0000	-0.0010	0.0148	0.0000	0.0654

	y	0.0000	-0.0127	0.0000	0.0000	-0.0111	0.0000
	z	-0.0010	0.0000	-0.0269	0.0654	0.0000	0.0148
C	x	-0.0269	-0.0010	0.0000	0.0148	0.0654	0.0000
	y	-0.0010	-0.0269	0.0000	0.0654	0.0148	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0127	0.0000	0.0000	-0.0111
C	x	-0.0269	0.0000	0.0010	0.0148	0.0000	-0.0654
	y	0.0000	-0.0127	0.0000	0.0000	-0.0111	0.0000
	z	0.0010	0.0000	-0.0269	-0.0654	0.0000	0.0148
C	x	-0.0269	0.0010	0.0000	0.0148	-0.0654	0.0000
	y	0.0010	-0.0269	0.0000	-0.0654	0.0148	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0127	0.0000	0.0000	-0.0111
Cr	x	-0.0615	0.0000	0.0000	-0.0074	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0615	0.0000	0.0000	-0.0074	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0615	0.0000	0.0000	-0.0074
Fe	x	0.0528	0.0000	0.0000	-0.0068	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0528	0.0000	0.0000	-0.0068	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0528	0.0000	0.0000	-0.0068

<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>319.14</b>	<b>319.14</b>	<b>319.14</b>	<b>339.76</b>	<b>339.76</b>	<b>339.76</b>
Cs	x	-0.0015	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0015	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0015	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	-0.0391	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0317	-0.0150	-0.0525	0.0000	0.0019
	z	0.0000	-0.0150	0.0317	-0.0019	0.0000	0.0525
N	x	-0.0391	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0317	0.0150	0.0525	0.0000	0.0019
	z	0.0000	0.0150	0.0317	-0.0019	0.0000	-0.0525
N	x	0.0317	0.0000	-0.0150	0.0525	-0.0019	0.0000
	y	0.0000	-0.0391	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0150	0.0000	0.0317	0.0019	-0.0525	0.0000
N	x	0.0317	-0.0150	0.0000	0.0000	0.0019	-0.0525
	y	-0.0150	0.0317	0.0000	0.0000	0.0525	-0.0019
	z	0.0000	0.0000	-0.0391	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0317	0.0000	0.0150	-0.0525	-0.0019	0.0000
	y	0.0000	-0.0391	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0150	0.0000	0.0317	0.0019	0.0525	0.0000
N	x	0.0317	0.0150	0.0000	0.0000	0.0019	0.0525
	y	0.0150	0.0317	0.0000	0.0000	-0.0525	-0.0019
	z	0.0000	0.0000	-0.0391	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0587	-0.0145	0.0644	0.0000	0.0017
	z	0.0000	-0.0145	0.0587	-0.0017	0.0000	-0.0644
C	x	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0587	0.0145	-0.0644	0.0000	0.0017
	z	0.0000	0.0145	0.0587	-0.0017	0.0000	0.0644
C	x	0.0587	0.0000	-0.0145	-0.0644	-0.0017	0.0000
	y	0.0000	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0145	0.0000	0.0587	0.0017	0.0644	0.0000
C	x	0.0587	-0.0145	0.0000	0.0000	0.0017	0.0644
	y	-0.0145	0.0587	0.0000	0.0000	-0.0644	-0.0017
	z	0.0000	0.0000	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0587	0.0000	0.0145	0.0644	-0.0017	0.0000
	y	0.0000	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0145	0.0000	0.0587	0.0017	-0.0644	0.0000
C	x	0.0587	0.0145	0.0000	0.0000	0.0017	-0.0644
	y	0.0145	0.0587	0.0000	0.0000	0.0644	-0.0017
	z	0.0000	0.0000	-0.0389	0.0000	0.0000	0.0000
Cr	x	-0.0188	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0188	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0188	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	-0.0249	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0249	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0249	0.0000	0.0000	0.0000

<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>439.79</b>	<b>439.79</b>	<b>439.79</b>	<b>443.89</b>	<b>443.89</b>	<b>464.53</b>
Cs	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0513	-0.0296	0.0409
	y	-0.0002	0.0000	0.0522	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0522	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0513	0.0296	-0.0409
	y	0.0002	0.0000	0.0522	0.0000	0.0000	0.0000

	z	-0.0522	0.0000	-0.0002	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0002	-0.0522	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0513	-0.0296
	z	0.0522	-0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0522	-0.0002	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0002	-0.0522	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0593	0.0409
N	x	-0.0002	-0.0522	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0513	0.0296	-0.0409
	z	0.0522	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0522	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0002	-0.0522	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0593	-0.0409
C	x	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0508	-0.0293	0.0406
	y	-0.0007	0.0000	-0.0503	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0503	0.0000	0.0007	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0508	0.0293	-0.0406
	y	0.0007	0.0000	-0.0503	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0503	0.0000	-0.0007	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0007	0.0503	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0508	-0.0293	0.0406
	z	-0.0503	-0.0007	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	-0.0503	-0.0007	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0007	0.0503	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0586	0.0406
C	x	-0.0007	0.0503	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0508	0.0293	-0.0406
	z	-0.0503	0.0007	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	-0.0503	0.0007	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0007	0.0503	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0586	-0.0406
Cr	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>465.94</b>	<b>465.94</b>	<b>465.94</b>	<b>491.90</b>	<b>491.90</b>	<b>491.90</b>
Cs	x	0.0000	0.0000	-0.0003	0.0001	0.0000	0.0000
	y	-0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0000
	z	0.0000	-0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001
N	x	0.0000	0.0000	-0.0018	0.0477	0.0000	0.0000
	y	0.0052	0.0487	0.0000	0.0000	0.0198	-0.0009
	z	0.0487	0.0052	0.0000	0.0000	-0.0009	0.0198
N	x	0.0000	0.0000	-0.0018	0.0477	0.0000	0.0000
	y	0.0052	-0.0487	0.0000	0.0000	0.0198	0.0009
	z	-0.0487	0.0052	0.0000	0.0000	0.0009	0.0198
N	x	0.0000	0.0487	0.0052	0.0198	0.0000	-0.0009
	y	-0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	0.0477	0.0000
	z	0.0000	0.0052	0.0487	-0.0009	0.0000	0.0198
N	x	0.0487	0.0000	0.0052	0.0198	-0.0009	0.0000
	y	0.0052	0.0000	0.0487	-0.0009	0.0198	0.0000
	z	0.0000	-0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	0.0477
N	x	0.0000	-0.0487	0.0052	0.0198	0.0000	0.0009
	y	-0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	0.0477	0.0000
	z	0.0000	0.0052	-0.0487	0.0009	0.0000	0.0198
N	x	-0.0487	0.0000	0.0052	0.0198	0.0009	0.0000
	y	0.0052	0.0000	-0.0487	0.0009	0.0198	0.0000
	z	0.0000	-0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	0.0477
C	x	0.0000	0.0000	-0.0017	0.0468	0.0000	0.0000
	y	-0.0030	-0.0506	0.0000	0.0000	-0.0050	0.0005
	z	-0.0506	-0.0030	0.0000	0.0000	0.0005	-0.0050
C	x	0.0000	0.0000	-0.0017	0.0468	0.0000	0.0000
	y	-0.0030	0.0506	0.0000	0.0000	-0.0050	-0.0005
	z	0.0506	-0.0030	0.0000	0.0000	-0.0005	-0.0050
C	x	0.0000	-0.0506	-0.0030	-0.0050	0.0000	0.0005
	y	-0.0017	0.0000	0.0000	0.0000	0.0468	0.0000
	z	0.0000	-0.0030	-0.0506	0.0005	0.0000	-0.0050
C	x	-0.0506	0.0000	-0.0030	-0.0050	0.0005	0.0000
	y	-0.0030	0.0000	-0.0506	0.0005	-0.0050	0.0000
	z	0.0000	-0.0017	0.0000	0.0000	0.0000	0.0468
C	x	0.0000	0.0506	-0.0030	-0.0050	0.0000	-0.0005
	y	-0.0017	0.0000	0.0000	0.0000	0.0468	0.0000

C	z	0.0000	-0.0030	0.0506	-0.0005	0.0000	-0.0050
	x	0.0506	0.0000	-0.0030	-0.0050	-0.0005	0.0000
	y	-0.0030	0.0000	0.0506	-0.0005	-0.0050	0.0000
Cr	z	0.0000	-0.0017	0.0000	0.0000	0.0000	0.0468
	x	0.0000	0.0000	0.0024	-0.0263	0.0000	0.0000
	y	0.0024	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0263	0.0000
Fe	z	0.0000	0.0024	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0263
	x	0.0000	0.0000	-0.0025	-0.0352	0.0000	0.0000
	y	-0.0025	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0352	0.0000
z	0.0000	-0.0025	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0352	

<b><math>\nu(\text{cm}^{-1})</math></b>		<b>501.11</b>	<b>501.11</b>	<b>501.11</b>	<b>2259.57</b>	<b>2259.57</b>	<b>2259.57</b>
Cs	x	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0198	0.0000	-0.0295	0.0000	0.0000
	y	-0.0402	0.0000	0.0043	0.0000	0.0002	0.0000
	z	0.0043	0.0000	-0.0402	0.0000	0.0000	0.0002
N	x	0.0000	0.0198	0.0000	-0.0295	0.0000	0.0000
	y	-0.0402	0.0000	-0.0043	0.0000	0.0002	0.0000
	z	-0.0043	0.0000	-0.0402	0.0000	0.0000	0.0002
N	x	0.0000	-0.0402	0.0043	0.0002	0.0000	0.0000
	y	0.0198	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0295	0.0000
	z	0.0000	0.0043	-0.0402	0.0000	0.0000	0.0002
N	x	0.0043	-0.0402	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	-0.0402	0.0043	0.0000	0.0000	0.0002	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0198	0.0000	0.0000	-0.0295
N	x	0.0000	-0.0402	-0.0043	0.0002	0.0000	0.0000
	y	0.0198	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0295	0.0000
	z	0.0000	-0.0043	-0.0402	0.0000	0.0000	0.0002
N	x	-0.0043	-0.0402	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	-0.0402	-0.0043	0.0000	0.0000	0.0002	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0198	0.0000	0.0000	-0.0295
C	x	0.0000	0.0192	0.0000	0.0347	0.0000	0.0000
	y	0.0376	0.0000	-0.0055	0.0000	-0.0001	0.0000
	z	-0.0055	0.0000	0.0376	0.0000	0.0000	-0.0001
C	x	0.0000	0.0192	0.0000	0.0347	0.0000	0.0000
	y	0.0376	0.0000	0.0055	0.0000	-0.0001	0.0000
	z	0.0055	0.0000	0.0376	0.0000	0.0000	-0.0001
C	x	0.0000	0.0376	-0.0055	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0192	0.0000	0.0000	0.0000	0.0347	0.0000
	z	0.0000	-0.0055	0.0376	0.0000	0.0000	-0.0001
C	x	-0.0055	0.0376	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0376	-0.0055	0.0000	0.0000	-0.0001	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0192	0.0000	0.0000	0.0347
C	x	0.0000	0.0376	0.0055	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0192	0.0000	0.0000	0.0000	0.0347	0.0000
	z	0.0000	0.0055	0.0376	0.0000	0.0000	-0.0001
C	x	0.0055	0.0376	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0376	0.0055	0.0000	0.0000	-0.0001	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0192	0.0000	0.0000	0.0347
Cr	x	0.0000	-0.0289	0.0000	-0.0005	0.0000	0.0000
	y	-0.0289	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0005	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0289	0.0000	0.0000	-0.0005
Fe	x	0.0000	0.0170	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	0.0170	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0170	0.0000	0.0000	0.0002

<b><math>\nu(\text{cm}^{-1})</math></b>		<b>2260.88</b>	<b>2260.88</b>	<b>2270.39</b>
Cs	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0208	0.0120	-0.0170
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	-0.0208	-0.0120	0.0170
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.0208	0.0120	-0.0170
	z	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	-0.0240	-0.0170



N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0208	-0.0120	0.0170
	z	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0240	0.0170
C	x	-0.0246	-0.0142	0.0200
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0246	0.0142	-0.0200
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0246	-0.0142	0.0200
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0284	0.0200
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.0246	0.0142	-0.0200
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	-0.0284	-0.0200
Cr	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000

### **F<sub>0</sub>=20%, HS**

<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>-0.04</b>	<b>-0.04</b>	<b>-0.03</b>	<b>37.59</b>	<b>40.34</b>	<b>40.34</b>
Cs	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	0.1221	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	0.1221
	z	0.0000	0.0000	0.0502	0.1266	0.0000	0.0000
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0625	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0003	0.0000	-0.0622
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0664	0.0000	-0.0072
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0625	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0003	0.0000	-0.0622
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0664	0.0000	0.0072
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0003	-0.0622	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0625
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0664	-0.0072	0.0000
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0003	-0.0622	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0625
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0664	0.0072	0.0000
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0645	0.0061
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	0.0061	-0.0645
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0645	0.0000	0.0000
N	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0645	-0.0061
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0061	-0.0645
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0645	0.0000	0.0000
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0624	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0045	0.0000	-0.0581
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0610	0.0000	-0.0012
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0624	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	-0.0045	0.0000	-0.0581
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0610	0.0000	0.0012
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0045	-0.0581	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0624
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0610	-0.0012	0.0000
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0045	-0.0581	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0624
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0610	0.0012	0.0000
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0593	0.0096
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	0.0096	-0.0593
	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0645	0.0000	0.0000
C	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0593	-0.0096
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	-0.0096	-0.0593

Cr	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0645	0.0000	0.0000
	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0604	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0604
Fe	z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0623	0.0000	0.0000
	x	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0621	0.0000
	y	0.0000	0.0502	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0621
z	0.0000	0.0000	0.0502	-0.0640	0.0000	0.0000	

<b><math>\nu(\text{cm}^{-1})</math></b>		<b>50.93</b>	<b>50.93</b>	<b>58.47</b>	<b>146.10</b>	<b>163.21</b>	<b>163.21</b>
Cs	x	-0.0039	0.0000	0.0000	0.0000	0.0004	0.0000
	y	0.0000	-0.0039	0.0000	0.0000	0.0000	0.0004
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0019	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0033	0.0000
	y	0.0000	-0.0023	-0.1548	0.0004	0.0000	-0.0788
	z	0.0000	-0.1704	-0.0079	-0.1055	0.0000	-0.0020
N	x	0.0019	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0033	0.0000
	y	0.0000	-0.0023	0.1548	-0.0004	0.0000	-0.0788
	z	0.0000	0.1704	-0.0079	-0.1055	0.0000	0.0020
N	x	-0.0023	0.0000	0.1548	-0.0004	-0.0788	0.0000
	y	0.0000	0.0019	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0033
	z	-0.1704	0.0000	0.0079	0.1055	-0.0020	0.0000
N	x	-0.0023	0.0000	-0.1548	0.0004	-0.0788	0.0000
	y	0.0000	0.0019	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0033
	z	0.1704	0.0000	0.0079	0.1055	0.0020	0.0000
N	x	0.0079	0.1652	0.0000	0.0000	0.1115	0.0008
	y	0.1652	0.0079	0.0000	0.0000	0.0008	0.1115
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0079	-0.1652	0.0000	0.0000	0.1115	-0.0008
	y	-0.1652	0.0079	0.0000	0.0000	-0.0008	0.1115
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0019	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0032	0.0000
	y	0.0000	0.0038	-0.1219	0.0074	0.0000	-0.0540
	z	0.0000	-0.1288	0.0000	-0.0643	0.0000	0.0051
C	x	0.0019	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0032	0.0000
	y	0.0000	0.0038	0.1219	-0.0074	0.0000	-0.0540
	z	0.0000	0.1288	0.0000	-0.0643	0.0000	-0.0051
C	x	0.0038	0.0000	0.1219	-0.0074	-0.0540	0.0000
	y	0.0000	0.0019	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0032
	z	-0.1288	0.0000	0.0000	0.0643	0.0051	0.0000
C	x	0.0038	0.0000	-0.1219	0.0074	-0.0540	0.0000
	y	0.0000	0.0019	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0032
	z	0.1288	0.0000	0.0000	0.0643	-0.0051	0.0000
C	x	0.0003	0.1264	0.0000	0.0000	0.0713	-0.0068
	y	0.1264	0.0003	0.0000	0.0000	-0.0068	0.0713
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0003	-0.1264	0.0000	0.0000	0.0713	0.0068
	y	-0.1264	0.0003	0.0000	0.0000	0.0068	0.0713
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Cr	x	0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0024	0.0000
	y	0.0000	0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0024
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0013	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0194	0.0000
	y	0.0000	0.0013	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0194
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

<b><math>\nu(\text{cm}^{-1})</math></b>		<b>209.19</b>	<b>209.19</b>	<b>210.78</b>	<b>221.89</b>	<b>221.89</b>	<b>227.96</b>
Cs	x	0.0004	0.0000	0.0000	-0.0004	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0004	0.0000	0.0000	-0.0004	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	-0.0156	0.0000	0.0000	0.0060	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0010	0.0081	0.0000	-0.0025	0.0623
	z	0.0000	0.0185	-0.0424	0.0000	0.0827	0.0464
N	x	-0.0156	0.0000	0.0000	0.0060	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0010	-0.0081	0.0000	-0.0025	-0.0623
	z	0.0000	-0.0185	-0.0424	0.0000	-0.0827	0.0464
N	x	-0.0010	0.0000	0.0081	-0.0025	0.0000	0.0623
	y	0.0000	-0.0156	0.0000	0.0000	0.0060	0.0000
	z	0.0185	0.0000	-0.0424	0.0827	0.0000	0.0464
N	x	-0.0010	0.0000	-0.0081	-0.0025	0.0000	-0.0623
	y	0.0000	-0.0156	0.0000	0.0000	0.0060	0.0000
	z	-0.0185	0.0000	-0.0424	-0.0827	0.0000	0.0464
N	x	0.0208	0.0194	0.0000	-0.0046	0.0832	0.0000
	y	0.0194	0.0208	0.0000	0.0832	-0.0046	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0097	0.0000	0.0000	-0.0208

N	x	0.0208	-0.0194	0.0000	-0.0046	-0.0832	0.0000
	y	-0.0194	0.0208	0.0000	-0.0832	-0.0046	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0097	0.0000	0.0000	-0.0208
C	x	-0.0177	0.0000	0.0000	0.0064	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0462	0.0070	0.0000	0.0060	0.0398
	z	0.0000	0.0119	-0.0458	0.0000	0.0501	-0.0031
C	x	-0.0177	0.0000	0.0000	0.0064	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0462	-0.0070	0.0000	0.0060	-0.0398
	z	0.0000	-0.0119	-0.0458	0.0000	-0.0501	-0.0031
C	x	-0.0462	0.0000	0.0070	0.0060	0.0000	0.0398
	y	0.0000	-0.0177	0.0000	0.0000	0.0064	0.0000
	z	0.0119	0.0000	-0.0458	0.0501	0.0000	-0.0031
C	x	-0.0462	0.0000	-0.0070	0.0060	0.0000	-0.0398
	y	0.0000	-0.0177	0.0000	0.0000	0.0064	0.0000
	z	-0.0119	0.0000	-0.0458	-0.0501	0.0000	-0.0031
C	x	-0.0290	0.0116	0.0000	0.0038	0.0541	0.0000
	y	0.0116	-0.0290	0.0000	0.0541	0.0038	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0084	0.0000	0.0000	-0.0223
C	x	-0.0290	-0.0116	0.0000	0.0038	-0.0541	0.0000
	y	-0.0116	-0.0290	0.0000	-0.0541	0.0038	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0084	0.0000	0.0000	-0.0223
Cr	x	-0.0450	0.0000	0.0000	0.0119	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0450	0.0000	0.0000	0.0119	0.0000
	z	0.0000	0.0000	-0.0071	0.0000	0.0000	-0.0394
Fe	x	0.0786	0.0000	0.0000	-0.0165	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0786	0.0000	0.0000	-0.0165	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0799	0.0000	0.0000	0.0128
<b>v(cm<sup>-1</sup>)</b>		<b>230.49</b>	<b>242.80</b>	<b>242.80</b>	<b>298.25</b>	<b>298.25</b>	<b>302.34</b>
Cs	x	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0007	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0322	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	0.0537	0.0000	-0.0807	0.0000	-0.0027	0.0497
	z	-0.0438	0.0000	-0.0051	0.0000	0.0481	-0.0020
N	x	0.0000	0.0322	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	-0.0537	0.0000	-0.0807	0.0000	-0.0027	-0.0497
	z	-0.0438	0.0000	0.0051	0.0000	-0.0481	-0.0020
N	x	0.0537	-0.0807	0.0000	-0.0027	0.0000	-0.0497
	y	0.0000	0.0000	0.0322	0.0000	0.0002	0.0000
	z	-0.0438	-0.0051	0.0000	0.0481	0.0000	0.0020
N	x	-0.0537	-0.0807	0.0000	-0.0027	0.0000	0.0497
	y	0.0000	0.0000	0.0322	0.0000	0.0002	0.0000
	z	-0.0438	0.0051	0.0000	-0.0481	0.0000	0.0020
N	x	0.0000	-0.0570	-0.0033	0.0025	-0.0495	0.0000
	y	0.0000	-0.0033	-0.0570	-0.0495	0.0025	0.0000
	z	0.0243	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	-0.0570	0.0033	0.0025	0.0495	0.0000
	y	0.0000	0.0033	-0.0570	0.0495	0.0025	0.0000
	z	0.0243	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0331	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	0.0368	0.0000	-0.0425	0.0000	-0.0040	-0.0735
	z	0.0070	0.0000	0.0009	0.0000	-0.0761	-0.0042
C	x	0.0000	0.0331	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000
	y	-0.0368	0.0000	-0.0425	0.0000	-0.0040	0.0735
	z	0.0070	0.0000	-0.0009	0.0000	0.0761	-0.0042
C	x	0.0368	-0.0425	0.0000	-0.0040	0.0000	0.0735
	y	0.0000	0.0000	0.0331	0.0000	0.0002	0.0000
	z	0.0070	0.0009	0.0000	-0.0761	0.0000	0.0042
C	x	-0.0368	-0.0425	0.0000	-0.0040	0.0000	-0.0735
	y	0.0000	0.0000	0.0331	0.0000	0.0002	0.0000
	z	0.0070	-0.0009	0.0000	0.0761	0.0000	0.0042
C	x	0.0000	-0.0113	-0.0011	0.0035	0.0736	0.0000
	y	0.0000	-0.0011	-0.0113	0.0736	0.0035	0.0000
	z	0.0262	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	-0.0113	0.0011	0.0035	-0.0736	0.0000
	y	0.0000	0.0011	-0.0113	-0.0736	0.0035	0.0000
	z	0.0262	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Cr	x	0.0000	0.0411	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0411	0.0000	0.0001	0.0000
	z	0.0465	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0000	0.0238	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0238	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0269	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

$\nu(\text{cm}^{-1})$		<b>370.78</b>	<b>375.04</b>	<b>375.04</b>	<b>376.20</b>	<b>377.87</b>	<b>378.60</b>
Cs	x	0.0000	0.0000	-0.0003	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0005	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	-0.0320	-0.0562	0.0000	-0.0344
	y	-0.0025	0.0123	0.0000	0.0000	0.0034	0.0000
	z	0.0374	0.0012	0.0000	0.0000	-0.0235	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	-0.0320	0.0562	0.0000	0.0344
	y	0.0025	0.0123	0.0000	0.0000	-0.0034	0.0000
	z	0.0374	-0.0012	0.0000	0.0000	-0.0235	0.0000
N	x	0.0025	0.0000	0.0123	0.0000	0.0034	0.0000
	y	0.0000	-0.0320	0.0000	0.0562	0.0000	-0.0344
	z	-0.0374	0.0000	0.0012	0.0000	-0.0235	0.0000
N	x	-0.0025	0.0000	0.0123	0.0000	-0.0034	0.0000
	y	0.0000	-0.0320	0.0000	-0.0562	0.0000	0.0344
	z	-0.0374	0.0000	-0.0012	0.0000	-0.0235	0.0000
N	x	0.0000	0.0043	-0.0445	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0445	0.0043	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0491	0.0624
N	x	0.0000	-0.0043	-0.0445	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0445	-0.0043	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0491	-0.0624
C	x	0.0000	0.0000	-0.0312	-0.0546	0.0000	-0.0334
	y	0.0009	-0.0144	0.0000	0.0000	-0.0015	0.0000
	z	-0.0716	-0.0018	0.0000	0.0000	0.0543	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	-0.0312	0.0546	0.0000	0.0334
	y	-0.0009	-0.0144	0.0000	0.0000	0.0015	0.0000
	z	-0.0716	0.0018	0.0000	0.0000	0.0543	0.0000
C	x	-0.0009	0.0000	-0.0144	0.0000	-0.0015	0.0000
	y	0.0000	-0.0312	0.0000	0.0546	0.0000	-0.0334
	z	0.0716	0.0000	-0.0018	0.0000	0.0543	0.0000
C	x	0.0009	0.0000	-0.0144	0.0000	0.0015	0.0000
	y	0.0000	-0.0312	0.0000	-0.0546	0.0000	0.0334
	z	0.0716	0.0000	0.0018	0.0000	0.0543	0.0000
C	x	0.0000	-0.0021	0.0904	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0904	-0.0021	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0482	0.0609
C	x	0.0000	0.0021	0.0904	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0904	0.0021	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0482	-0.0609
Cr	x	0.0000	0.0000	0.0026	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0026	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0041	0.0000
Fe	x	0.0000	0.0000	0.0114	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0114	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0195	0.0000
$\nu(\text{cm}^{-1})$		<b>385.83</b>	<b>385.83</b>	<b>414.63</b>	<b>414.63</b>	<b>419.32</b>	<b>434.24</b>
Cs	x	-0.0003	0.0000	-0.0006	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0003	0.0000	-0.0006	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0005	0.0000
N	x	-0.0352	0.0000	-0.0041	0.0000	0.0000	0.0411
	y	0.0000	-0.0500	0.0000	0.0012	-0.0373	0.0000
	z	0.0000	0.0036	0.0000	-0.0356	0.0013	0.0000
N	x	-0.0352	0.0000	-0.0041	0.0000	0.0000	-0.0411
	y	0.0000	-0.0500	0.0000	0.0012	0.0373	0.0000
	z	0.0000	-0.0036	0.0000	0.0356	0.0013	0.0000
N	x	-0.0500	0.0000	0.0012	0.0000	-0.0373	0.0000
	y	0.0000	-0.0352	0.0000	-0.0041	0.0000	0.0411
	z	0.0036	0.0000	-0.0356	0.0000	0.0013	0.0000
N	x	-0.0500	0.0000	0.0012	0.0000	0.0373	0.0000
	y	0.0000	-0.0352	0.0000	-0.0041	0.0000	-0.0411
	z	-0.0036	0.0000	0.0356	0.0000	0.0013	0.0000
N	x	0.0063	0.0010	0.0008	-0.0364	0.0000	0.0000
	y	0.0010	0.0063	-0.0364	0.0008	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0037	0.0451
N	x	0.0063	-0.0010	0.0008	0.0364	0.0000	0.0000
	y	-0.0010	0.0063	0.0364	0.0008	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0037	-0.0451
C	x	-0.0341	0.0000	-0.0040	0.0000	0.0000	0.0403
	y	0.0000	0.0816	0.0000	0.0015	0.0659	0.0000
	z	0.0000	-0.0018	0.0000	0.0668	0.0012	0.0000
C	x	-0.0341	0.0000	-0.0040	0.0000	0.0000	-0.0403

	y	0.0000	0.0816	0.0000	0.0015	-0.0659	0.0000
	z	0.0000	0.0018	0.0000	-0.0668	0.0012	0.0000
C	x	0.0816	0.0000	0.0015	0.0000	0.0659	0.0000
	y	0.0000	-0.0341	0.0000	-0.0040	0.0000	0.0403
	z	-0.0018	0.0000	0.0668	0.0000	0.0012	0.0000
C	x	0.0816	0.0000	0.0015	0.0000	-0.0659	0.0000
	y	0.0000	-0.0341	0.0000	-0.0040	0.0000	-0.0403
	z	0.0018	0.0000	-0.0668	0.0000	0.0012	0.0000
C	x	-0.0071	-0.0013	0.0025	0.0675	0.0000	0.0000
	y	-0.0013	-0.0071	0.0675	0.0025	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0036	0.0446
C	x	-0.0071	0.0013	0.0025	-0.0675	0.0000	0.0000
	y	0.0013	-0.0071	-0.0675	0.0025	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0036	-0.0446
Cr	x	0.0081	0.0000	0.0018	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0081	0.0000	0.0018	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0018	0.0000
Fe	x	0.0155	0.0000	0.0009	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0155	0.0000	0.0009	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0007	0.0000

$\nu(\text{cm}^{-1})$		474.71	477.72	477.72	2251.57	2251.57	2251.63
Cs	x	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0387	0.0000	-0.0294	0.0000	0.0207
	y	-0.0009	0.0000	-0.0213	0.0000	0.0001	0.0000
	z	-0.0184	0.0000	-0.0007	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	0.0387	0.0000	-0.0294	0.0000	-0.0207
	y	0.0009	0.0000	-0.0213	0.0000	0.0001	0.0000
	z	-0.0184	0.0000	0.0007	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	-0.0009	-0.0213	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0387	0.0000	-0.0294	-0.0207
	z	-0.0184	-0.0007	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0009	-0.0213	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0387	0.0000	-0.0294	0.0207
	z	-0.0184	0.0007	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	-0.0178	-0.0008	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0008	-0.0178	0.0000	0.0001	0.0000
	z	0.0390	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	0.0000	-0.0178	0.0008	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0008	-0.0178	0.0000	0.0001	0.0000
	z	0.0390	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0367	0.0000	0.0350	0.0000	-0.0248
	y	0.0029	0.0000	0.0341	0.0000	-0.0001	0.0000
	z	0.0323	0.0000	0.0027	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0367	0.0000	0.0350	0.0000	0.0248
	y	-0.0029	0.0000	0.0341	0.0000	-0.0001	0.0000
	z	0.0323	0.0000	-0.0027	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0029	0.0341	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0367	0.0000	0.0350	0.0248
	z	0.0323	0.0027	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	-0.0029	0.0341	0.0000	-0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0367	0.0000	0.0350	-0.0248
	z	0.0323	-0.0027	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0305	0.0028	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0028	0.0305	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0368	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0305	-0.0028	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	-0.0028	0.0305	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0368	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Cr	x	0.0000	-0.0451	0.0000	-0.0005	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	-0.0451	0.0000	-0.0005	0.0000
	z	-0.0458	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Fe	x	0.0000	-0.0011	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	-0.0011	0.0000	0.0001	0.0000
	z	-0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

$\nu(\text{cm}^{-1})$		2254.56	2262.45	2265.04
Cs	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
N	x	-0.0201	0.0000	-0.0050
	y	0.0000	0.0000	0.0000

	z	0.0000	0.0001	0.0000
N	x	0.0201	0.0000	0.0050
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0001	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.0201	0.0000	-0.0050
	z	0.0000	0.0001	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0201	0.0000	0.0050
	z	0.0000	0.0001	0.0000
N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0069	-0.0293	-0.0285
N	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0069	-0.0293	0.0285
C	x	0.0240	0.0000	0.0058
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	-0.0240	0.0000	-0.0058
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0240	0.0000	0.0058
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	-0.0240	0.0000	-0.0058
	z	0.0000	0.0000	0.0000
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	-0.0083	0.0348	0.0338
C	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0083	0.0348	-0.0338
Cr	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	-0.0006	0.0000
Fe	x	0.0000	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	0.0000
	z	0.0000	0.0002	0.0000

## VI. Tabulated dielectric functions at damping factors $\gamma = 30$ and $1 \text{ cm}^{-1}$

$\nu$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\gamma = 30 \text{ cm}^{-1}$						$\gamma = 1 \text{ cm}^{-1}$					
	HS $\epsilon_{xx}$		HS $\epsilon_{zz}$		LS		HS $\epsilon_{xx}$		HS $\epsilon_{zz}$		LS	
	Re( $\epsilon$ )	Im( $\epsilon$ )	Re( $\epsilon$ )	Im( $\epsilon$ )	Re( $\epsilon$ )	Im( $\epsilon$ )	Re( $\epsilon$ )	Im( $\epsilon$ )	Re( $\epsilon$ )	Im( $\epsilon$ )	Re( $\epsilon$ )	Im( $\epsilon$ )
0	4.283	0.000	4.717	0.000	3.687	0.000	4.283	0.000	4.717	0.000	3.687	0.000
1	4.284	0.023	4.717	0.032	3.687	0.005	4.284	0.001	4.718	0.001	3.687	0.000
2	4.285	0.045	4.719	0.064	3.688	0.009	4.286	0.002	4.721	0.002	3.688	0.000
3	4.286	0.068	4.721	0.096	3.688	0.014	4.290	0.002	4.727	0.003	3.689	0.000
4	4.289	0.092	4.724	0.129	3.689	0.019	4.295	0.003	4.734	0.004	3.690	0.001
5	4.292	0.116	4.727	0.163	3.690	0.024	4.302	0.004	4.744	0.005	3.691	0.001
6	4.296	0.140	4.732	0.198	3.692	0.029	4.311	0.005	4.756	0.007	3.693	0.001
7	4.301	0.165	4.737	0.234	3.693	0.034	4.321	0.006	4.771	0.008	3.695	0.001
8	4.306	0.191	4.742	0.271	3.695	0.039	4.333	0.007	4.788	0.009	3.697	0.001
9	4.312	0.218	4.749	0.309	3.697	0.044	4.347	0.007	4.808	0.011	3.700	0.001
10	4.318	0.246	4.755	0.350	3.699	0.049	4.363	0.008	4.831	0.012	3.703	0.002
11	4.325	0.276	4.762	0.392	3.702	0.055	4.381	0.010	4.857	0.014	3.707	0.002
12	4.332	0.307	4.769	0.437	3.705	0.060	4.402	0.011	4.886	0.016	3.711	0.002
13	4.340	0.340	4.776	0.485	3.708	0.066	4.424	0.012	4.920	0.018	3.715	0.002
14	4.347	0.374	4.783	0.535	3.711	0.072	4.450	0.013	4.957	0.020	3.720	0.002
15	4.355	0.411	4.788	0.588	3.715	0.078	4.478	0.015	4.999	0.022	3.725	0.003
16	4.363	0.450	4.793	0.645	3.719	0.085	4.510	0.017	5.046	0.025	3.730	0.003
17	4.370	0.492	4.797	0.706	3.723	0.092	4.545	0.018	5.098	0.028	3.736	0.003
18	4.377	0.536	4.798	0.770	3.728	0.099	4.583	0.021	5.157	0.031	3.743	0.003
19	4.383	0.584	4.797	0.839	3.733	0.106	4.627	0.023	5.224	0.035	3.750	0.004
20	4.388	0.635	4.792	0.912	3.738	0.114	4.675	0.026	5.299	0.040	3.757	0.004
21	4.391	0.689	4.783	0.989	3.743	0.122	4.729	0.029	5.383	0.045	3.765	0.004
22	4.392	0.747	4.769	1.071	3.749	0.130	4.789	0.032	5.480	0.052	3.774	0.004
23	4.391	0.809	4.749	1.158	3.755	0.139	4.857	0.036	5.590	0.059	3.783	0.005
24	4.385	0.875	4.721	1.248	3.761	0.149	4.934	0.041	5.717	0.068	3.793	0.005
25	4.375	0.946	4.684	1.341	3.768	0.158	5.020	0.046	5.865	0.080	3.804	0.006
26	4.360	1.020	4.637	1.436	3.775	0.169	5.119	0.053	6.037	0.094	3.815	0.006
27	4.339	1.097	4.578	1.533	3.782	0.180	5.233	0.061	6.242	0.112	3.828	0.006
28	4.310	1.178	4.507	1.628	3.789	0.192	5.364	0.071	6.487	0.135	3.841	0.007
29	4.272	1.262	4.423	1.720	3.797	0.205	5.518	0.083	6.786	0.167	3.855	0.007
30	4.225	1.346	4.326	1.806	3.805	0.219	5.699	0.099	7.159	0.210	3.871	0.008
31	4.167	1.430	4.215	1.884	3.814	0.233	5.916	0.120	7.633	0.272	3.887	0.009
32	4.097	1.512	4.092	1.950	3.822	0.249	6.179	0.147	8.258	0.366	3.905	0.009
33	4.015	1.590	3.959	2.001	3.831	0.266	6.507	0.184	9.116	0.518	3.924	0.010
34	3.921	1.662	3.818	2.036	3.840	0.284	6.922	0.238	10.363	0.785	3.945	0.011
35	3.817	1.724	3.673	2.053	3.848	0.303	7.467	0.318	12.330	1.324	3.967	0.012
36	3.702	1.774	3.527	2.051	3.857	0.324	8.210	0.447	15.841	2.670	3.991	0.013
37	3.579	1.810	3.384	2.031	3.866	0.346	9.283	0.671	23.388	7.669	4.018	0.014
38	3.452	1.830	3.248	1.993	3.875	0.370	10.955	1.115	29.078	43.946	4.047	0.015
39	3.322	1.834	3.121	1.939	3.883	0.396	13.891	2.192	-24.054	19.465	4.078	0.016
40	3.194	1.822	3.006	1.873	3.891	0.425	20.061	5.958	-12.231	4.623	4.112	0.018
41	3.071	1.793	2.904	1.797	3.898	0.455	29.132	32.083	-6.894	1.932	4.150	0.020
42	2.955	1.750	2.816	1.714	3.904	0.488	-22.633	21.715	-4.192	1.046	4.192	0.022
43	2.849	1.694	2.741	1.626	3.909	0.523	-11.699	4.707	-2.586	0.653	4.238	0.024
44	2.754	1.629	2.680	1.537	3.912	0.561	-6.452	1.885	-1.528	0.446	4.290	0.027
45	2.671	1.557	2.631	1.448	3.913	0.602	-3.853	1.000	-0.779	0.323	4.347	0.031
46	2.600	1.480	2.594	1.360	3.911	0.645	-2.328	0.618	-0.222	0.245	4.412	0.035
47	2.541	1.401	2.566	1.275	3.907	0.692	-1.330	0.420	0.208	0.192	4.486	0.039
48	2.493	1.321	2.546	1.194	3.898	0.741	-0.625	0.306	0.550	0.154	4.569	0.045
49	2.456	1.242	2.534	1.118	3.885	0.793	-0.094	0.238	0.828	0.127	4.666	0.052
50	2.427	1.165	2.528	1.046	3.867	0.847	0.335	0.212	1.059	0.106	4.779	0.061
51	2.407	1.091	2.527	0.978	3.843	0.902	0.621	0.341	1.254	0.090	4.912	0.073
52	2.393	1.021	2.531	0.915	3.812	0.958	0.736	0.168	1.420	0.077	5.070	0.087
53	2.386	0.955	2.537	0.857	3.773	1.015	0.985	0.111	1.564	0.067	5.263	0.107
54	2.383	0.893	2.547	0.803	3.727	1.069	1.180	0.088	1.689	0.059	5.501	0.135
55	2.384	0.835	2.558	0.753	3.672	1.121	1.341	0.074	1.799	0.052	5.804	0.174
56	2.388	0.781	2.572	0.707	3.608	1.168	1.477	0.063	1.897	0.046	6.202	0.233
57	2.395	0.731	2.586	0.664	3.538	1.208	1.594	0.055	1.984	0.041	6.746	0.328
58	2.404	0.684	2.602	0.625	3.460	1.240	1.697	0.048	2.063	0.037	7.534	0.495
59	2.415	0.641	2.618	0.589	3.377	1.263	1.788	0.043	2.134	0.034	8.771	0.829
60	2.427	0.602	2.634	0.556	3.291	1.274	1.868	0.038	2.198	0.031	10.965	1.657
61	2.440	0.565	2.651	0.525	3.204	1.275	1.940	0.034	2.257	0.028	15.640	4.662
62	2.454	0.532	2.668	0.497	3.118	1.264	2.005	0.031	2.311	0.026	20.530	26.234
63	2.468	0.500	2.685	0.471	3.036	1.242	2.064	0.028	2.361	0.024	-14.791	13.446

64	2.482	0.472	2.702	0.447	2.958	1.211	2.118	0.026	2.407	0.022	-7.096	3.093
65	2.497	0.445	2.719	0.425	2.888	1.171	2.167	0.023	2.450	0.021	-3.567	1.274
66	2.511	0.421	2.736	0.405	2.825	1.125	2.212	0.022	2.489	0.019	-1.794	0.685
67	2.526	0.398	2.752	0.386	2.770	1.074	2.253	0.020	2.526	0.018	-0.745	0.426
68	2.540	0.377	2.768	0.368	2.724	1.020	2.291	0.018	2.561	0.017	-0.056	0.290
69	2.554	0.358	2.784	0.352	2.686	0.965	2.327	0.017	2.594	0.016	0.431	0.210
70	2.568	0.340	2.800	0.337	2.655	0.910	2.360	0.016	2.624	0.015	0.792	0.159
71	2.582	0.324	2.815	0.323	2.631	0.855	2.391	0.015	2.653	0.014	1.071	0.124
72	2.596	0.308	2.830	0.310	2.614	0.802	2.420	0.014	2.680	0.013	1.293	0.100
73	2.609	0.294	2.845	0.298	2.601	0.751	2.447	0.013	2.706	0.013	1.473	0.082
74	2.622	0.281	2.860	0.287	2.593	0.702	2.472	0.012	2.731	0.012	1.623	0.069
75	2.635	0.269	2.874	0.277	2.589	0.657	2.496	0.012	2.754	0.011	1.748	0.058
76	2.647	0.257	2.888	0.267	2.589	0.614	2.519	0.011	2.777	0.011	1.856	0.050
77	2.659	0.246	2.901	0.258	2.591	0.574	2.540	0.010	2.798	0.010	1.949	0.043
78	2.671	0.237	2.915	0.250	2.595	0.537	2.561	0.010	2.818	0.010	2.030	0.038
79	2.683	0.227	2.928	0.242	2.600	0.503	2.580	0.009	2.838	0.010	2.101	0.034
80	2.694	0.219	2.941	0.235	2.607	0.471	2.598	0.009	2.857	0.009	2.164	0.030
81	2.705	0.211	2.953	0.228	2.615	0.441	2.616	0.009	2.875	0.009	2.220	0.027
82	2.716	0.203	2.966	0.222	2.624	0.414	2.633	0.008	2.893	0.009	2.271	0.024
83	2.726	0.196	2.978	0.216	2.634	0.389	2.649	0.008	2.909	0.008	2.316	0.022
84	2.737	0.190	2.990	0.211	2.643	0.366	2.664	0.008	2.926	0.008	2.358	0.020
85	2.747	0.184	3.002	0.206	2.654	0.344	2.679	0.007	2.942	0.008	2.396	0.018
86	2.756	0.178	3.013	0.202	2.664	0.324	2.693	0.007	2.957	0.008	2.430	0.017
87	2.766	0.173	3.025	0.197	2.674	0.306	2.706	0.007	2.972	0.007	2.462	0.015
88	2.775	0.168	3.036	0.193	2.684	0.289	2.720	0.006	2.987	0.007	2.491	0.014
89	2.785	0.163	3.047	0.190	2.694	0.273	2.732	0.006	3.001	0.007	2.518	0.013
90	2.794	0.159	3.058	0.186	2.704	0.259	2.744	0.006	3.015	0.007	2.543	0.012
91	2.802	0.155	3.069	0.183	2.714	0.245	2.756	0.006	3.029	0.007	2.566	0.011
92	2.811	0.151	3.080	0.181	2.724	0.233	2.768	0.006	3.042	0.007	2.588	0.010
93	2.820	0.147	3.091	0.178	2.734	0.221	2.779	0.006	3.055	0.006	2.608	0.010
94	2.828	0.144	3.101	0.176	2.743	0.210	2.790	0.005	3.068	0.006	2.627	0.009
95	2.836	0.141	3.112	0.174	2.752	0.200	2.801	0.005	3.080	0.006	2.645	0.009
96	2.844	0.138	3.122	0.172	2.761	0.190	2.811	0.005	3.093	0.006	2.662	0.008
97	2.852	0.136	3.132	0.170	2.769	0.182	2.821	0.005	3.105	0.006	2.678	0.008
98	2.860	0.133	3.143	0.168	2.778	0.173	2.831	0.005	3.117	0.006	2.693	0.007
99	2.868	0.131	3.153	0.167	2.786	0.166	2.841	0.005	3.129	0.006	2.707	0.007
100	2.876	0.129	3.163	0.166	2.794	0.159	2.850	0.005	3.141	0.006	2.720	0.007
101	2.883	0.127	3.173	0.165	2.802	0.152	2.859	0.005	3.153	0.006	2.733	0.006
102	2.891	0.126	3.183	0.164	2.809	0.145	2.869	0.005	3.164	0.006	2.745	0.006
103	2.898	0.124	3.193	0.164	2.817	0.140	2.878	0.004	3.176	0.006	2.756	0.006
104	2.906	0.123	3.204	0.163	2.824	0.134	2.887	0.004	3.187	0.006	2.767	0.005
105	2.913	0.122	3.214	0.163	2.831	0.129	2.895	0.004	3.199	0.006	2.777	0.005
106	2.920	0.121	3.224	0.163	2.837	0.124	2.904	0.004	3.210	0.006	2.787	0.005
107	2.928	0.120	3.234	0.162	2.844	0.119	2.913	0.004	3.222	0.006	2.797	0.005
108	2.935	0.119	3.244	0.163	2.850	0.115	2.921	0.004	3.233	0.006	2.806	0.004
109	2.942	0.119	3.254	0.163	2.856	0.111	2.930	0.004	3.244	0.006	2.815	0.004
110	2.949	0.118	3.264	0.163	2.862	0.107	2.938	0.004	3.256	0.006	2.823	0.004
111	2.956	0.118	3.274	0.164	2.868	0.103	2.946	0.004	3.267	0.006	2.831	0.004
112	2.963	0.118	3.285	0.164	2.874	0.100	2.955	0.004	3.278	0.006	2.839	0.004
113	2.970	0.118	3.295	0.165	2.879	0.096	2.963	0.004	3.290	0.006	2.846	0.004
114	2.977	0.118	3.305	0.166	2.885	0.093	2.971	0.004	3.301	0.006	2.853	0.004
115	2.985	0.118	3.316	0.167	2.890	0.090	2.980	0.004	3.313	0.006	2.860	0.003
116	2.992	0.119	3.326	0.168	2.895	0.088	2.988	0.004	3.324	0.006	2.867	0.003
117	2.999	0.119	3.337	0.169	2.900	0.085	2.997	0.004	3.336	0.006	2.873	0.003
118	3.006	0.120	3.347	0.171	2.905	0.082	3.005	0.004	3.347	0.006	2.879	0.003
119	3.013	0.121	3.358	0.172	2.909	0.080	3.014	0.004	3.359	0.006	2.885	0.003
120	3.020	0.122	3.369	0.174	2.914	0.078	3.022	0.004	3.371	0.006	2.891	0.003
121	3.027	0.123	3.380	0.176	2.919	0.076	3.031	0.004	3.383	0.006	2.897	0.003
122	3.035	0.125	3.391	0.178	2.923	0.074	3.040	0.004	3.395	0.006	2.902	0.003
123	3.042	0.126	3.402	0.180	2.927	0.072	3.049	0.004	3.408	0.006	2.908	0.003
124	3.049	0.128	3.413	0.182	2.932	0.070	3.058	0.005	3.420	0.006	2.913	0.003
125	3.057	0.130	3.425	0.185	2.936	0.068	3.067	0.005	3.432	0.006	2.918	0.002
126	3.064	0.133	3.436	0.187	2.940	0.067	3.076	0.005	3.445	0.006	2.923	0.002
127	3.072	0.135	3.448	0.190	2.944	0.065	3.086	0.005	3.458	0.007	2.927	0.002
128	3.079	0.138	3.460	0.193	2.948	0.063	3.096	0.005	3.471	0.007	2.932	0.002
129	3.087	0.141	3.472	0.196	2.951	0.062	3.106	0.005	3.485	0.007	2.937	0.002
130	3.095	0.144	3.484	0.199	2.955	0.061	3.116	0.005	3.498	0.007	2.941	0.002
131	3.102	0.147	3.497	0.202	2.959	0.059	3.127	0.005	3.512	0.007	2.945	0.002
132	3.110	0.151	3.510	0.206	2.962	0.058	3.138	0.006	3.526	0.007	2.950	0.002
133	3.118	0.155	3.522	0.210	2.966	0.057	3.149	0.006	3.540	0.007	2.954	0.002
134	3.126	0.160	3.535	0.214	2.969	0.056	3.161	0.006	3.555	0.007	2.958	0.002
135	3.134	0.165	3.549	0.218	2.973	0.055	3.173	0.006	3.569	0.007	2.962	0.002
136	3.142	0.170	3.562	0.222	2.976	0.054	3.186	0.007	3.584	0.008	2.965	0.002
137	3.150	0.176	3.576	0.227	2.979	0.053	3.199	0.007	3.600	0.008	2.969	0.002



138	3.158	0.182	3.590	0.231	2.983	0.052	3.213	0.007	3.615	0.008	2.973	0.002
139	3.166	0.189	3.604	0.236	2.986	0.051	3.228	0.008	3.632	0.008	2.977	0.002
140	3.174	0.196	3.619	0.242	2.989	0.051	3.244	0.008	3.648	0.008	2.980	0.002
141	3.182	0.204	3.634	0.247	2.992	0.050	3.260	0.009	3.665	0.009	2.984	0.002
142	3.190	0.213	3.649	0.253	2.995	0.049	3.278	0.009	3.682	0.009	2.987	0.002
143	3.197	0.222	3.665	0.259	2.998	0.048	3.297	0.010	3.700	0.009	2.991	0.002
144	3.204	0.233	3.680	0.265	3.001	0.048	3.318	0.011	3.718	0.009	2.994	0.002
145	3.211	0.243	3.697	0.272	3.004	0.047	3.340	0.012	3.736	0.009	2.997	0.002
146	3.217	0.255	3.713	0.279	3.007	0.047	3.364	0.013	3.755	0.010	3.000	0.002
147	3.223	0.268	3.730	0.287	3.010	0.046	3.391	0.014	3.775	0.010	3.004	0.002
148	3.228	0.281	3.747	0.294	3.013	0.046	3.421	0.016	3.795	0.010	3.007	0.002
149	3.232	0.295	3.765	0.302	3.016	0.045	3.454	0.018	3.816	0.010	3.010	0.002
150	3.235	0.310	3.783	0.311	3.019	0.045	3.492	0.020	3.837	0.011	3.013	0.002
151	3.236	0.326	3.802	0.320	3.021	0.044	3.536	0.024	3.859	0.011	3.016	0.002
152	3.236	0.342	3.821	0.329	3.024	0.044	3.587	0.028	3.881	0.011	3.019	0.002
153	3.235	0.358	3.841	0.339	3.027	0.044	3.647	0.033	3.905	0.012	3.022	0.002
154	3.231	0.374	3.861	0.350	3.030	0.043	3.721	0.041	3.929	0.012	3.025	0.001
155	3.226	0.391	3.881	0.361	3.032	0.043	3.813	0.052	3.954	0.013	3.028	0.001
156	3.218	0.406	3.902	0.372	3.035	0.043	3.932	0.069	3.980	0.013	3.031	0.001
157	3.209	0.421	3.924	0.385	3.038	0.043	4.094	0.097	4.006	0.014	3.034	0.001
158	3.197	0.433	3.946	0.398	3.041	0.042	4.327	0.146	4.034	0.014	3.037	0.001
159	3.184	0.444	3.969	0.411	3.043	0.042	4.694	0.248	4.062	0.015	3.040	0.001
160	3.170	0.453	3.992	0.426	3.046	0.042	5.354	0.510	4.092	0.015	3.043	0.001
161	3.154	0.458	4.016	0.441	3.049	0.042	6.794	1.552	4.123	0.016	3.046	0.001
162	3.139	0.461	4.041	0.457	3.051	0.042	6.294	8.993	4.155	0.016	3.049	0.001
163	3.124	0.462	4.066	0.474	3.054	0.042	-1.283	2.705	4.188	0.017	3.052	0.001
164	3.111	0.459	4.092	0.492	3.057	0.042	0.623	0.707	4.223	0.018	3.055	0.001
165	3.098	0.454	4.119	0.511	3.059	0.042	1.470	0.310	4.259	0.018	3.057	0.001
166	3.088	0.448	4.147	0.531	3.062	0.042	1.913	0.174	4.297	0.019	3.060	0.001
167	3.080	0.440	4.175	0.553	3.065	0.042	2.185	0.112	4.336	0.020	3.063	0.001
168	3.074	0.431	4.205	0.576	3.067	0.042	2.370	0.079	4.377	0.021	3.066	0.001
169	3.070	0.421	4.235	0.600	3.070	0.042	2.504	0.059	4.420	0.022	3.069	0.001
170	3.069	0.412	4.266	0.626	3.073	0.042	2.609	0.047	4.466	0.023	3.072	0.001
171	3.070	0.402	4.297	0.654	3.075	0.042	2.692	0.038	4.513	0.024	3.075	0.001
172	3.073	0.394	4.330	0.684	3.078	0.043	2.762	0.032	4.563	0.026	3.078	0.001
173	3.077	0.386	4.364	0.715	3.081	0.043	2.821	0.028	4.616	0.027	3.081	0.001
174	3.084	0.378	4.398	0.749	3.083	0.043	2.873	0.025	4.671	0.029	3.083	0.001
175	3.091	0.373	4.433	0.785	3.086	0.043	2.920	0.022	4.730	0.030	3.086	0.001
176	3.100	0.368	4.469	0.824	3.089	0.044	2.962	0.020	4.792	0.032	3.089	0.001
177	3.110	0.364	4.506	0.866	3.092	0.044	3.002	0.019	4.858	0.034	3.092	0.002
178	3.120	0.362	4.544	0.911	3.094	0.044	3.039	0.018	4.928	0.036	3.095	0.002
179	3.131	0.361	4.582	0.959	3.097	0.045	3.074	0.017	5.002	0.038	3.099	0.002
180	3.143	0.362	4.622	1.011	3.100	0.045	3.108	0.017	5.081	0.041	3.102	0.002
181	3.156	0.364	4.661	1.066	3.103	0.046	3.141	0.017	5.166	0.044	3.105	0.002
182	3.168	0.367	4.701	1.127	3.106	0.046	3.174	0.016	5.257	0.047	3.108	0.002
183	3.181	0.371	4.741	1.192	3.109	0.047	3.207	0.017	5.354	0.051	3.111	0.002
184	3.194	0.377	4.781	1.262	3.111	0.047	3.240	0.017	5.459	0.055	3.114	0.002
185	3.207	0.385	4.821	1.338	3.114	0.048	3.274	0.017	5.573	0.059	3.118	0.002
186	3.220	0.394	4.860	1.420	3.117	0.049	3.309	0.018	5.696	0.064	3.121	0.002
187	3.233	0.405	4.898	1.508	3.120	0.049	3.345	0.018	5.830	0.070	3.124	0.002
188	3.246	0.417	4.934	1.604	3.124	0.050	3.383	0.019	5.977	0.077	3.128	0.002
189	3.258	0.430	4.968	1.708	3.127	0.051	3.422	0.021	6.137	0.084	3.131	0.002
190	3.269	0.446	4.998	1.820	3.130	0.052	3.465	0.022	6.314	0.093	3.135	0.002
191	3.280	0.463	5.024	1.941	3.133	0.053	3.511	0.024	6.511	0.104	3.138	0.002
192	3.290	0.482	5.044	2.071	3.136	0.054	3.560	0.026	6.729	0.116	3.142	0.002
193	3.298	0.502	5.058	2.211	3.140	0.055	3.615	0.029	6.975	0.130	3.146	0.002
194	3.305	0.524	5.062	2.362	3.143	0.056	3.676	0.032	7.252	0.148	3.150	0.002
195	3.310	0.548	5.056	2.522	3.146	0.057	3.744	0.037	7.567	0.169	3.154	0.002
196	3.312	0.573	5.037	2.692	3.150	0.058	3.823	0.042	7.930	0.195	3.158	0.002
197	3.313	0.599	5.003	2.871	3.153	0.060	3.915	0.050	8.351	0.228	3.162	0.002
198	3.310	0.626	4.951	3.058	3.157	0.061	4.024	0.060	8.846	0.271	3.166	0.002
199	3.304	0.653	4.877	3.252	3.161	0.062	4.157	0.075	9.437	0.326	3.170	0.002
200	3.295	0.680	4.781	3.449	3.164	0.064	4.324	0.096	10.155	0.400	3.175	0.002
201	3.283	0.706	4.658	3.646	3.168	0.066	4.543	0.129	11.045	0.502	3.179	0.002
202	3.267	0.730	4.508	3.838	3.172	0.067	4.845	0.183	12.179	0.650	3.184	0.002
203	3.248	0.752	4.328	4.022	3.176	0.069	5.291	0.286	13.669	0.874	3.189	0.002
204	3.227	0.771	4.120	4.190	3.180	0.071	6.021	0.512	15.718	1.238	3.194	0.003
205	3.204	0.786	3.885	4.337	3.184	0.073	7.420	1.175	18.706	1.887	3.199	0.003
206	3.179	0.798	3.625	4.457	3.188	0.075	10.559	4.571	23.450	3.216	3.204	0.003
207	3.155	0.805	3.346	4.544	3.193	0.078	-2.313	14.123	32.029	6.624	3.209	0.003
208	3.131	0.808	3.055	4.594	3.197	0.080	-2.521	2.433	50.761	19.936	3.215	0.003
209	3.109	0.808	2.758	4.605	3.202	0.083	-0.227	0.815	49.514	116.160	3.221	0.003
210	3.090	0.805	2.464	4.577	3.206	0.085	0.836	0.402	-57.709	37.927	3.227	0.003
211	3.073	0.799	2.180	4.511	3.211	0.088	1.436	0.241	-31.856	9.672	3.233	0.003

212	3.060	0.791	1.913	4.411	3.216	0.091	1.824	0.164	-20.400	4.175	3.240	0.003
213	3.050	0.783	1.668	4.282	3.221	0.095	2.102	0.121	-14.491	2.302	3.246	0.003
214	3.043	0.774	1.449	4.130	3.226	0.098	2.314	0.096	-10.930	1.455	3.253	0.004
215	3.040	0.767	1.259	3.961	3.231	0.102	2.487	0.080	-8.557	1.003	3.261	0.004
216	3.040	0.760	1.097	3.781	3.237	0.106	2.636	0.071	-6.861	0.735	3.269	0.004
217	3.042	0.755	0.962	3.595	3.242	0.111	2.772	0.067	-5.587	0.563	3.277	0.004
218	3.046	0.751	0.854	3.408	3.248	0.115	2.904	0.068	-4.591	0.447	3.285	0.004
219	3.053	0.750	0.769	3.224	3.253	0.120	3.046	0.079	-3.788	0.366	3.294	0.005
220	3.060	0.751	0.704	3.045	3.259	0.125	3.224	0.115	-3.120	0.308	3.303	0.005
221	3.069	0.755	0.658	2.873	3.265	0.131	3.512	0.281	-2.550	0.266	3.313	0.005
222	3.079	0.762	0.627	2.710	3.271	0.137	3.233	1.342	-2.050	0.238	3.323	0.005
223	3.090	0.771	0.609	2.556	3.278	0.144	2.610	0.329	-1.593	0.223	3.334	0.006
224	3.100	0.784	0.600	2.412	3.284	0.151	2.916	0.121	-1.154	0.223	3.346	0.006
225	3.110	0.800	0.601	2.276	3.290	0.158	3.096	0.077	-0.692	0.255	3.358	0.006
226	3.120	0.818	0.607	2.149	3.297	0.167	3.231	0.063	-0.114	0.383	3.371	0.007
227	3.129	0.841	0.620	2.031	3.303	0.175	3.350	0.058	0.819	1.073	3.385	0.007
228	3.136	0.867	0.636	1.920	3.310	0.185	3.464	0.057	-1.562	3.368	3.400	0.008
229	3.141	0.896	0.656	1.816	3.317	0.195	3.579	0.059	-1.536	0.704	3.417	0.008
230	3.144	0.929	0.679	1.718	3.323	0.206	3.700	0.063	-0.699	0.385	3.434	0.009
231	3.143	0.966	0.704	1.626	3.330	0.218	3.832	0.069	0.037	0.566	3.453	0.010
232	3.138	1.005	0.731	1.540	3.336	0.231	3.978	0.078	-0.283	2.328	3.473	0.011
233	3.127	1.048	0.759	1.459	3.343	0.245	4.144	0.089	-1.288	0.592	3.495	0.012
234	3.111	1.092	0.790	1.382	3.348	0.261	4.337	0.105	-0.727	0.220	3.519	0.013
235	3.089	1.138	0.821	1.310	3.354	0.277	4.567	0.128	-0.407	0.133	3.546	0.014
236	3.059	1.184	0.854	1.242	3.359	0.295	4.850	0.159	-0.186	0.097	3.575	0.015
237	3.021	1.229	0.887	1.178	3.363	0.314	5.208	0.205	-0.013	0.078	3.607	0.017
238	2.975	1.272	0.922	1.118	3.366	0.335	5.680	0.278	0.130	0.067	3.643	0.019
239	2.921	1.310	0.956	1.062	3.368	0.357	6.333	0.399	0.254	0.058	3.684	0.022
240	2.860	1.342	0.991	1.010	3.369	0.381	7.304	0.623	0.363	0.052	3.730	0.025
241	2.792	1.367	1.027	0.960	3.367	0.406	8.895	1.114	0.462	0.047	3.782	0.028
242	2.720	1.383	1.062	0.914	3.364	0.433	11.934	2.518	0.551	0.043	3.843	0.033
243	2.644	1.388	1.097	0.871	3.358	0.461	18.811	9.377	0.634	0.040	3.913	0.038
244	2.567	1.383	1.132	0.831	3.349	0.491	-6.763	35.053	0.710	0.037	3.996	0.046
245	2.492	1.367	1.166	0.794	3.337	0.521	-11.278	6.122	0.781	0.034	4.097	0.055
246	2.420	1.341	1.200	0.759	3.321	0.552	-5.746	1.959	0.847	0.032	4.219	0.068
247	2.353	1.306	1.233	0.726	3.300	0.582	-3.238	0.937	0.909	0.030	4.372	0.087
248	2.292	1.263	1.266	0.695	3.276	0.612	-1.863	0.546	0.967	0.028	4.570	0.114
249	2.239	1.214	1.299	0.667	3.246	0.640	-1.001	0.357	1.023	0.027	4.833	0.156
250	2.194	1.162	1.330	0.640	3.212	0.665	-0.411	0.252	1.075	0.025	5.203	0.227
251	2.157	1.107	1.361	0.615	3.174	0.686	0.019	0.188	1.125	0.024	5.759	0.359
252	2.128	1.050	1.392	0.592	3.133	0.703	0.346	0.145	1.172	0.023	6.681	0.651
253	2.105	0.994	1.421	0.570	3.089	0.714	0.604	0.116	1.217	0.022	8.465	1.502
254	2.090	0.939	1.451	0.549	3.043	0.720	0.813	0.095	1.260	0.021	12.499	5.835
255	2.080	0.885	1.479	0.530	2.996	0.719	0.985	0.079	1.301	0.020	-3.967	18.588
256	2.075	0.834	1.507	0.512	2.951	0.712	1.131	0.067	1.340	0.019	-4.559	3.193
257	2.074	0.785	1.534	0.495	2.907	0.699	1.255	0.058	1.378	0.019	-1.580	1.053
258	2.077	0.739	1.561	0.479	2.866	0.681	1.362	0.050	1.415	0.018	-0.219	0.510
259	2.083	0.697	1.587	0.464	2.829	0.659	1.456	0.044	1.450	0.017	0.532	0.299
260	2.091	0.657	1.612	0.449	2.797	0.633	1.540	0.039	1.483	0.017	1.004	0.196
261	2.102	0.619	1.637	0.436	2.769	0.605	1.614	0.035	1.516	0.016	1.328	0.138
262	2.113	0.585	1.661	0.424	2.745	0.575	1.681	0.032	1.548	0.016	1.563	0.103
263	2.126	0.553	1.685	0.412	2.726	0.545	1.741	0.029	1.578	0.015	1.742	0.079
264	2.140	0.523	1.708	0.401	2.711	0.514	1.796	0.026	1.608	0.015	1.882	0.063
265	2.155	0.496	1.731	0.390	2.700	0.484	1.846	0.024	1.636	0.014	1.996	0.051
266	2.170	0.471	1.754	0.380	2.691	0.455	1.892	0.022	1.664	0.014	2.089	0.043
267	2.186	0.448	1.776	0.371	2.686	0.428	1.935	0.021	1.691	0.013	2.167	0.036
268	2.201	0.426	1.797	0.362	2.684	0.401	1.974	0.019	1.717	0.013	2.234	0.031
269	2.217	0.406	1.819	0.354	2.683	0.376	2.011	0.018	1.743	0.013	2.291	0.027
270	2.233	0.388	1.839	0.346	2.684	0.353	2.046	0.017	1.768	0.012	2.341	0.023
271	2.249	0.371	1.860	0.339	2.686	0.331	2.078	0.016	1.792	0.012	2.385	0.021
272	2.264	0.355	1.880	0.332	2.690	0.311	2.109	0.015	1.816	0.012	2.424	0.018
273	2.280	0.341	1.900	0.325	2.694	0.293	2.137	0.014	1.840	0.012	2.459	0.017
274	2.295	0.328	1.919	0.319	2.699	0.275	2.164	0.013	1.862	0.011	2.490	0.015
275	2.310	0.315	1.938	0.313	2.705	0.259	2.190	0.013	1.885	0.011	2.519	0.014
276	2.325	0.304	1.957	0.308	2.711	0.245	2.215	0.012	1.907	0.011	2.544	0.012
277	2.340	0.293	1.976	0.303	2.717	0.231	2.238	0.011	1.928	0.011	2.568	0.011
278	2.354	0.283	1.994	0.298	2.724	0.219	2.261	0.011	1.949	0.010	2.590	0.010
279	2.369	0.274	2.012	0.294	2.730	0.207	2.282	0.011	1.970	0.010	2.610	0.010
280	2.383	0.265	2.030	0.290	2.737	0.196	2.303	0.010	1.990	0.010	2.629	0.009
281	2.396	0.258	2.048	0.286	2.744	0.187	2.323	0.010	2.010	0.010	2.646	0.008
282	2.410	0.250	2.065	0.282	2.750	0.178	2.342	0.009	2.030	0.010	2.663	0.008
283	2.423	0.244	2.083	0.279	2.757	0.169	2.360	0.009	2.050	0.010	2.678	0.008
284	2.437	0.237	2.100	0.276	2.764	0.161	2.378	0.009	2.069	0.010	2.693	0.007
285	2.450	0.231	2.117	0.273	2.770	0.154	2.395	0.009	2.088	0.009	2.707	0.007

286	2.463	0.226	2.134	0.270	2.776	0.148	2.412	0.008	2.107	0.009	2.721	0.007
287	2.475	0.221	2.150	0.268	2.782	0.141	2.428	0.008	2.126	0.009	2.735	0.007
288	2.488	0.217	2.167	0.266	2.788	0.136	2.444	0.008	2.144	0.009	2.751	0.009
289	2.500	0.212	2.184	0.264	2.794	0.130	2.460	0.008	2.162	0.009	2.771	0.014
290	2.512	0.208	2.200	0.262	2.800	0.125	2.475	0.008	2.181	0.009	2.799	0.048
291	2.524	0.205	2.216	0.261	2.806	0.121	2.490	0.007	2.199	0.009	2.719	0.051
292	2.536	0.202	2.233	0.260	2.811	0.116	2.504	0.007	2.217	0.009	2.745	0.014
293	2.548	0.199	2.249	0.258	2.817	0.112	2.519	0.007	2.235	0.009	2.764	0.008
294	2.560	0.196	2.265	0.258	2.822	0.109	2.533	0.007	2.252	0.009	2.777	0.006
295	2.571	0.193	2.281	0.257	2.827	0.105	2.547	0.007	2.270	0.009	2.788	0.005
296	2.583	0.191	2.297	0.257	2.832	0.102	2.560	0.007	2.288	0.009	2.797	0.005
297	2.594	0.189	2.313	0.256	2.837	0.099	2.574	0.007	2.305	0.009	2.806	0.004
298	2.605	0.188	2.329	0.256	2.842	0.096	2.587	0.007	2.323	0.009	2.814	0.004
299	2.617	0.186	2.345	0.257	2.847	0.093	2.600	0.007	2.341	0.009	2.822	0.004
300	2.628	0.185	2.361	0.257	2.852	0.091	2.613	0.006	2.358	0.009	2.829	0.004
301	2.639	0.184	2.377	0.258	2.856	0.089	2.626	0.006	2.376	0.009	2.836	0.004
302	2.650	0.183	2.393	0.258	2.861	0.087	2.639	0.006	2.394	0.009	2.843	0.003
303	2.661	0.182	2.409	0.259	2.865	0.085	2.652	0.006	2.412	0.009	2.850	0.003
304	2.672	0.182	2.425	0.261	2.869	0.083	2.664	0.006	2.430	0.009	2.856	0.003
305	2.683	0.182	2.442	0.262	2.873	0.082	2.677	0.006	2.448	0.009	2.863	0.003
306	2.694	0.181	2.458	0.264	2.877	0.081	2.690	0.006	2.466	0.009	2.869	0.003
307	2.705	0.182	2.474	0.266	2.881	0.079	2.702	0.006	2.484	0.009	2.876	0.003
308	2.717	0.182	2.491	0.268	2.885	0.079	2.715	0.006	2.503	0.009	2.883	0.003
309	2.728	0.182	2.508	0.270	2.889	0.078	2.728	0.006	2.521	0.009	2.889	0.003
310	2.739	0.183	2.524	0.273	2.892	0.077	2.741	0.006	2.540	0.009	2.896	0.004
311	2.750	0.184	2.541	0.276	2.895	0.076	2.753	0.006	2.559	0.010	2.903	0.004
312	2.761	0.185	2.558	0.279	2.898	0.076	2.766	0.006	2.578	0.010	2.911	0.004
313	2.773	0.186	2.575	0.283	2.901	0.076	2.779	0.006	2.598	0.010	2.919	0.004
314	2.784	0.188	2.593	0.286	2.904	0.075	2.792	0.007	2.617	0.010	2.929	0.005
315	2.795	0.190	2.610	0.291	2.907	0.075	2.805	0.007	2.637	0.010	2.939	0.006
316	2.807	0.192	2.628	0.295	2.909	0.075	2.819	0.007	2.658	0.010	2.952	0.007
317	2.819	0.194	2.646	0.300	2.911	0.075	2.832	0.007	2.678	0.010	2.969	0.010
318	2.830	0.196	2.664	0.305	2.913	0.074	2.846	0.007	2.699	0.011	2.992	0.015
319	2.842	0.199	2.683	0.310	2.915	0.074	2.859	0.007	2.721	0.011	3.028	0.025
320	2.854	0.202	2.702	0.316	2.916	0.073	2.873	0.007	2.743	0.011	3.097	0.059
321	2.866	0.205	2.720	0.322	2.918	0.072	2.888	0.007	2.765	0.011	3.244	0.249
322	2.879	0.208	2.740	0.329	2.919	0.072	2.902	0.007	2.788	0.012	2.593	0.498
323	2.891	0.212	2.759	0.336	2.921	0.070	2.917	0.007	2.811	0.012	2.684	0.089
324	2.904	0.216	2.779	0.344	2.922	0.069	2.932	0.008	2.835	0.012	2.775	0.033
325	2.917	0.220	2.800	0.352	2.923	0.068	2.947	0.008	2.860	0.012	2.819	0.017
326	2.930	0.224	2.820	0.360	2.925	0.067	2.963	0.008	2.885	0.013	2.845	0.011
327	2.943	0.229	2.841	0.370	2.927	0.065	2.979	0.008	2.911	0.013	2.863	0.008
328	2.956	0.234	2.863	0.380	2.929	0.063	2.995	0.008	2.938	0.014	2.876	0.006
329	2.970	0.240	2.884	0.390	2.931	0.062	3.012	0.009	2.965	0.014	2.887	0.005
330	2.984	0.246	2.907	0.401	2.933	0.060	3.029	0.009	2.993	0.014	2.896	0.004
331	2.998	0.253	2.929	0.413	2.935	0.059	3.047	0.009	3.023	0.015	2.903	0.003
332	3.012	0.259	2.952	0.426	2.937	0.057	3.066	0.009	3.053	0.015	2.909	0.003
333	3.027	0.267	2.976	0.440	2.939	0.056	3.085	0.010	3.085	0.016	2.915	0.003
334	3.042	0.275	3.000	0.454	2.942	0.054	3.104	0.010	3.117	0.017	2.921	0.003
335	3.057	0.283	3.025	0.470	2.944	0.053	3.124	0.010	3.151	0.017	2.926	0.002
336	3.072	0.292	3.050	0.486	2.947	0.052	3.145	0.011	3.186	0.018	2.930	0.002
337	3.088	0.302	3.076	0.504	2.949	0.051	3.167	0.011	3.223	0.019	2.934	0.002
338	3.104	0.312	3.102	0.523	2.952	0.050	3.190	0.012	3.261	0.020	2.939	0.002
339	3.121	0.323	3.129	0.544	2.954	0.049	3.213	0.012	3.301	0.020	2.942	0.002
340	3.138	0.335	3.157	0.566	2.957	0.048	3.238	0.013	3.343	0.021	2.946	0.002
341	3.155	0.348	3.185	0.589	2.960	0.047	3.264	0.013	3.387	0.023	2.950	0.002
342	3.172	0.362	3.213	0.614	2.962	0.046	3.291	0.014	3.433	0.024	2.953	0.002
343	3.190	0.377	3.242	0.641	2.965	0.045	3.319	0.014	3.482	0.025	2.957	0.002
344	3.208	0.392	3.272	0.671	2.967	0.045	3.349	0.015	3.533	0.026	2.960	0.002
345	3.226	0.409	3.302	0.702	2.970	0.044	3.380	0.016	3.587	0.028	2.963	0.002
346	3.245	0.428	3.333	0.736	2.973	0.044	3.413	0.017	3.645	0.030	2.966	0.002
347	3.264	0.448	3.364	0.772	2.975	0.043	3.448	0.018	3.706	0.032	2.970	0.002
348	3.283	0.469	3.396	0.812	2.978	0.043	3.485	0.019	3.771	0.034	2.973	0.002
349	3.302	0.492	3.427	0.854	2.980	0.042	3.525	0.020	3.840	0.036	2.976	0.001
350	3.322	0.517	3.459	0.900	2.983	0.042	3.567	0.022	3.915	0.039	2.979	0.001
351	3.341	0.543	3.491	0.950	2.986	0.041	3.613	0.024	3.995	0.042	2.981	0.001
352	3.360	0.572	3.522	1.004	2.988	0.041	3.661	0.025	4.081	0.045	2.984	0.001
353	3.379	0.603	3.553	1.062	2.991	0.041	3.714	0.027	4.175	0.049	2.987	0.001
354	3.397	0.637	3.582	1.125	2.993	0.041	3.771	0.030	4.276	0.053	2.990	0.001
355	3.415	0.673	3.611	1.193	2.996	0.040	3.833	0.033	4.386	0.058	2.993	0.001
356	3.432	0.713	3.638	1.267	2.998	0.040	3.901	0.036	4.508	0.064	2.996	0.001
357	3.448	0.755	3.662	1.347	3.001	0.040	3.976	0.039	4.641	0.070	2.998	0.001
358	3.461	0.800	3.683	1.433	3.003	0.040	4.059	0.044	4.789	0.078	3.001	0.001
359	3.473	0.849	3.700	1.526	3.006	0.040	4.152	0.049	4.953	0.087	3.004	0.001

360	3.483	0.901	3.712	1.626	3.008	0.040	4.256	0.056	5.138	0.098	3.007	0.001
361	3.489	0.956	3.717	1.733	3.011	0.039	4.375	0.064	5.346	0.111	3.009	0.001
362	3.491	1.015	3.715	1.847	3.013	0.039	4.512	0.074	5.584	0.127	3.012	0.001
363	3.489	1.076	3.703	1.969	3.016	0.039	4.671	0.087	5.857	0.147	3.015	0.001
364	3.482	1.140	3.680	2.097	3.018	0.039	4.859	0.104	6.175	0.173	3.017	0.001
365	3.469	1.207	3.644	2.230	3.021	0.039	5.087	0.127	6.550	0.205	3.020	0.001
366	3.449	1.274	3.593	2.368	3.023	0.039	5.369	0.159	6.999	0.248	3.023	0.001
367	3.422	1.342	3.525	2.509	3.026	0.039	5.729	0.208	7.547	0.306	3.025	0.001
368	3.389	1.410	3.439	2.649	3.028	0.039	6.209	0.285	8.230	0.387	3.028	0.001
369	3.347	1.476	3.332	2.786	3.031	0.040	6.886	0.419	9.105	0.505	3.031	0.001
370	3.299	1.538	3.204	2.917	3.033	0.040	7.923	0.687	10.268	0.686	3.033	0.001
371	3.244	1.597	3.055	3.036	3.036	0.040	9.721	1.344	11.886	0.988	3.036	0.001
372	3.183	1.650	2.887	3.139	3.039	0.040	13.490	3.737	14.291	1.541	3.039	0.001
373	3.117	1.697	2.702	3.223	3.041	0.040	17.173	20.939	18.216	2.728	3.042	0.001
374	3.048	1.739	2.502	3.282	3.044	0.040	-10.078	10.358	25.625	6.028	3.044	0.001
375	2.976	1.774	2.294	3.315	3.046	0.040	-3.961	2.458	42.381	21.222	3.047	0.001
376	2.902	1.803	2.082	3.320	3.049	0.041	-1.076	1.070	-7.892	96.434	3.050	0.001
377	2.827	1.827	1.872	3.296	3.051	0.041	0.480	0.632	-35.627	17.962	3.053	0.001
378	2.751	1.846	1.670	3.244	3.054	0.041	1.517	0.455	-20.252	5.465	3.055	0.001
379	2.675	1.860	1.480	3.168	3.057	0.041	2.331	0.384	-13.379	2.550	3.058	0.001
380	2.596	1.869	1.306	3.071	3.059	0.042	3.070	0.373	-9.670	1.464	3.061	0.001
381	2.517	1.874	1.152	2.956	3.062	0.042	3.838	0.414	-7.371	0.948	3.064	0.001
382	2.436	1.873	1.018	2.830	3.065	0.042	4.748	0.527	-5.811	0.663	3.067	0.001
383	2.354	1.866	0.905	2.695	3.068	0.043	5.986	0.780	-4.684	0.490	3.070	0.001
384	2.271	1.852	0.812	2.556	3.070	0.043	7.959	1.405	-3.832	0.377	3.072	0.001
385	2.188	1.831	0.739	2.416	3.073	0.044	11.824	3.501	-3.165	0.299	3.075	0.001
386	2.106	1.801	0.684	2.277	3.076	0.044	19.143	16.934	-2.629	0.243	3.078	0.001
387	2.027	1.763	0.644	2.143	3.079	0.044	-16.212	18.685	-2.188	0.202	3.081	0.002
388	1.952	1.717	0.618	2.014	3.082	0.045	-9.203	3.693	-1.819	0.170	3.084	0.002
389	1.883	1.663	0.603	1.891	3.085	0.045	-5.235	1.423	-1.506	0.145	3.087	0.002
390	1.821	1.603	0.599	1.775	3.087	0.046	-3.289	0.748	-1.236	0.126	3.090	0.002
391	1.767	1.538	0.603	1.667	3.090	0.046	-2.149	0.463	-1.001	0.110	3.094	0.002
392	1.722	1.470	0.613	1.565	3.093	0.047	-1.398	0.317	-0.794	0.097	3.097	0.002
393	1.684	1.400	0.629	1.471	3.096	0.047	-0.864	0.231	-0.611	0.086	3.100	0.002
394	1.655	1.329	0.650	1.384	3.099	0.048	-0.463	0.177	-0.448	0.078	3.103	0.002
395	1.634	1.259	0.674	1.303	3.103	0.049	-0.149	0.141	-0.301	0.070	3.106	0.002
396	1.620	1.190	0.700	1.229	3.106	0.049	0.104	0.115	-0.168	0.063	3.110	0.002
397	1.613	1.124	0.729	1.160	3.109	0.050	0.314	0.096	-0.046	0.058	3.113	0.002
398	1.611	1.061	0.759	1.096	3.112	0.051	0.491	0.082	0.064	0.053	3.117	0.002
399	1.614	1.001	0.790	1.038	3.115	0.051	0.642	0.071	0.166	0.049	3.120	0.002
400	1.621	0.945	0.822	0.984	3.119	0.052	0.774	0.062	0.260	0.045	3.124	0.002
401	1.631	0.893	0.855	0.934	3.122	0.053	0.890	0.055	0.347	0.042	3.127	0.002
402	1.644	0.844	0.887	0.888	3.125	0.054	0.993	0.049	0.428	0.039	3.131	0.002
403	1.659	0.798	0.920	0.846	3.129	0.055	1.085	0.044	0.504	0.037	3.135	0.002
404	1.675	0.756	0.953	0.807	3.132	0.056	1.169	0.040	0.575	0.034	3.138	0.002
405	1.693	0.717	0.985	0.772	3.136	0.056	1.245	0.037	0.641	0.032	3.142	0.002
406	1.712	0.682	1.017	0.739	3.139	0.057	1.316	0.034	0.704	0.031	3.146	0.002
407	1.732	0.649	1.048	0.708	3.143	0.058	1.382	0.032	0.764	0.029	3.150	0.002
408	1.752	0.618	1.079	0.680	3.147	0.060	1.444	0.030	0.821	0.028	3.154	0.002
409	1.773	0.590	1.110	0.654	3.151	0.061	1.504	0.030	0.874	0.026	3.158	0.002
410	1.794	0.564	1.140	0.630	3.154	0.062	1.564	0.031	0.926	0.025	3.162	0.002
411	1.815	0.541	1.169	0.608	3.158	0.063	1.630	0.039	0.976	0.024	3.166	0.002
412	1.835	0.519	1.198	0.588	3.162	0.064	1.718	0.089	1.023	0.024	3.171	0.002
413	1.856	0.499	1.227	0.570	3.166	0.065	1.571	0.195	1.070	0.023	3.175	0.002
414	1.877	0.480	1.254	0.553	3.171	0.067	1.623	0.049	1.116	0.023	3.180	0.002
415	1.897	0.463	1.282	0.537	3.175	0.068	1.690	0.029	1.161	0.023	3.184	0.002
416	1.918	0.448	1.309	0.522	3.179	0.070	1.739	0.023	1.208	0.024	3.189	0.002
417	1.938	0.433	1.335	0.509	3.183	0.071	1.781	0.020	1.260	0.029	3.194	0.002
418	1.958	0.420	1.361	0.497	3.188	0.073	1.819	0.018	1.325	0.047	3.199	0.002
419	1.978	0.408	1.386	0.486	3.192	0.074	1.854	0.017	1.379	0.186	3.204	0.003
420	1.997	0.397	1.411	0.476	3.197	0.076	1.886	0.016	1.220	0.087	3.209	0.003
421	2.017	0.387	1.436	0.466	3.202	0.078	1.918	0.015	1.298	0.034	3.214	0.003
422	2.036	0.378	1.461	0.458	3.207	0.079	1.948	0.015	1.351	0.024	3.220	0.003
423	2.055	0.370	1.485	0.451	3.211	0.081	1.977	0.014	1.394	0.020	3.225	0.003
424	2.074	0.363	1.509	0.444	3.217	0.083	2.005	0.014	1.432	0.018	3.231	0.003
425	2.093	0.357	1.532	0.439	3.222	0.085	2.032	0.014	1.468	0.017	3.237	0.003
426	2.112	0.352	1.556	0.434	3.227	0.088	2.059	0.013	1.502	0.017	3.243	0.003
427	2.130	0.347	1.579	0.430	3.232	0.090	2.085	0.013	1.536	0.016	3.249	0.003
428	2.148	0.343	1.602	0.427	3.238	0.092	2.111	0.013	1.568	0.016	3.255	0.003
429	2.167	0.340	1.625	0.425	3.243	0.095	2.137	0.013	1.600	0.016	3.262	0.003
430	2.185	0.338	1.648	0.423	3.249	0.097	2.162	0.013	1.632	0.016	3.269	0.003
431	2.203	0.336	1.671	0.423	3.255	0.100	2.187	0.012	1.663	0.016	3.275	0.003
432	2.221	0.335	1.694	0.423	3.261	0.103	2.211	0.012	1.695	0.016	3.282	0.004
433	2.239	0.335	1.717	0.424	3.267	0.106	2.236	0.012	1.726	0.016	3.290	0.004

434	2.257	0.336	1.739	0.427	3.274	0.109	2.261	0.012	1.758	0.016	3.297	0.004
435	2.275	0.337	1.762	0.430	3.280	0.112	2.286	0.012	1.790	0.016	3.305	0.004
436	2.293	0.339	1.784	0.434	3.287	0.116	2.311	0.013	1.822	0.016	3.313	0.004
437	2.311	0.342	1.807	0.439	3.294	0.119	2.336	0.013	1.855	0.017	3.321	0.004
438	2.329	0.346	1.829	0.445	3.301	0.123	2.362	0.013	1.889	0.017	3.330	0.004
439	2.347	0.350	1.852	0.453	3.308	0.127	2.388	0.013	1.923	0.017	3.339	0.005
440	2.365	0.356	1.874	0.461	3.316	0.131	2.415	0.013	1.958	0.018	3.348	0.005
441	2.383	0.362	1.896	0.471	3.323	0.136	2.442	0.014	1.994	0.018	3.358	0.005
442	2.401	0.369	1.918	0.483	3.331	0.140	2.470	0.014	2.032	0.019	3.367	0.005
443	2.419	0.378	1.940	0.495	3.339	0.145	2.499	0.015	2.070	0.020	3.378	0.005
444	2.437	0.387	1.962	0.510	3.347	0.151	2.528	0.015	2.111	0.021	3.388	0.005
445	2.455	0.398	1.984	0.526	3.356	0.156	2.559	0.016	2.153	0.022	3.399	0.006
446	2.473	0.410	2.006	0.544	3.365	0.162	2.591	0.016	2.198	0.023	3.411	0.006
447	2.491	0.423	2.027	0.563	3.374	0.168	2.625	0.017	2.245	0.024	3.423	0.006
448	2.509	0.438	2.047	0.585	3.383	0.174	2.660	0.018	2.295	0.026	3.435	0.006
449	2.527	0.454	2.067	0.609	3.392	0.181	2.697	0.019	2.348	0.028	3.448	0.007
450	2.545	0.472	2.086	0.636	3.402	0.189	2.736	0.020	2.405	0.030	3.462	0.007
451	2.562	0.492	2.104	0.665	3.412	0.196	2.778	0.022	2.467	0.032	3.476	0.007
452	2.579	0.514	2.121	0.697	3.423	0.204	2.822	0.023	2.534	0.035	3.491	0.008
453	2.595	0.537	2.136	0.732	3.433	0.213	2.870	0.025	2.607	0.038	3.507	0.008
454	2.611	0.564	2.149	0.770	3.444	0.222	2.922	0.027	2.688	0.042	3.523	0.008
455	2.626	0.592	2.160	0.811	3.455	0.232	2.977	0.029	2.777	0.047	3.540	0.009
456	2.639	0.623	2.167	0.855	3.467	0.243	3.038	0.032	2.878	0.053	3.559	0.009
457	2.651	0.657	2.171	0.902	3.479	0.254	3.105	0.035	2.991	0.061	3.578	0.010
458	2.661	0.694	2.171	0.953	3.491	0.266	3.179	0.039	3.121	0.070	3.598	0.010
459	2.669	0.733	2.165	1.006	3.504	0.279	3.262	0.044	3.272	0.082	3.620	0.011
460	2.674	0.776	2.153	1.062	3.516	0.293	3.355	0.049	3.449	0.097	3.643	0.012
461	2.675	0.822	2.135	1.119	3.529	0.307	3.460	0.057	3.660	0.117	3.667	0.013
462	2.672	0.870	2.109	1.177	3.543	0.323	3.582	0.065	3.918	0.144	3.694	0.014
463	2.665	0.921	2.074	1.235	3.557	0.340	3.722	0.076	4.241	0.183	3.723	0.015
464	2.651	0.975	2.030	1.292	3.570	0.358	3.888	0.091	4.657	0.241	3.755	0.018
465	2.632	1.030	1.978	1.345	3.585	0.378	4.087	0.110	5.215	0.332	3.794	0.023
466	2.605	1.086	1.916	1.392	3.599	0.399	4.331	0.136	6.005	0.487	3.845	0.051
467	2.570	1.141	1.846	1.433	3.613	0.421	4.637	0.174	7.204	0.784	3.794	0.075
468	2.526	1.195	1.768	1.464	3.628	0.446	5.032	0.229	9.237	1.465	3.845	0.030
469	2.474	1.245	1.686	1.485	3.642	0.472	5.563	0.316	13.304	3.602	3.896	0.025
470	2.414	1.291	1.599	1.495	3.657	0.501	6.316	0.466	21.989	16.119	3.945	0.025
471	2.345	1.330	1.512	1.492	3.671	0.531	7.464	0.753	-18.483	27.392	3.995	0.026
472	2.270	1.360	1.426	1.476	3.685	0.565	9.418	1.414	-12.014	4.972	4.048	0.028
473	2.190	1.380	1.343	1.449	3.698	0.601	13.350	3.513	-6.941	1.801	4.106	0.030
474	2.106	1.389	1.267	1.412	3.710	0.640	21.599	16.072	-4.540	0.911	4.169	0.033
475	2.022	1.386	1.197	1.366	3.721	0.682	-17.269	24.655	-3.176	0.547	4.238	0.036
476	1.938	1.372	1.136	1.314	3.730	0.727	-10.596	4.552	-2.301	0.365	4.315	0.041
477	1.859	1.347	1.084	1.257	3.737	0.776	-5.899	1.669	-1.693	0.261	4.401	0.045
478	1.785	1.312	1.041	1.196	3.741	0.829	-3.665	0.849	-1.247	0.196	4.497	0.051
479	1.718	1.269	1.006	1.134	3.743	0.885	-2.392	0.511	-0.904	0.152	4.606	0.058
480	1.659	1.219	0.980	1.072	3.740	0.946	-1.574	0.341	-0.633	0.122	4.730	0.067
481	1.608	1.165	0.961	1.011	3.732	1.010	-1.005	0.244	-0.413	0.100	4.873	0.077
482	1.566	1.108	0.948	0.952	3.719	1.077	-0.587	0.183	-0.231	0.084	5.040	0.091
483	1.532	1.050	0.941	0.896	3.698	1.148	-0.266	0.143	-0.077	0.071	5.238	0.108
484	1.505	0.992	0.938	0.842	3.670	1.220	-0.013	0.114	0.055	0.061	5.474	0.131
485	1.486	0.934	0.940	0.791	3.633	1.295	0.193	0.094	0.169	0.053	5.764	0.162
486	1.473	0.879	0.945	0.744	3.587	1.369	0.364	0.078	0.269	0.047	6.126	0.205
487	1.464	0.826	0.952	0.699	3.529	1.442	0.507	0.066	0.357	0.042	6.592	0.269
488	1.461	0.775	0.962	0.658	3.461	1.511	0.630	0.057	0.435	0.037	7.213	0.368
489	1.461	0.727	0.973	0.619	3.382	1.574	0.736	0.050	0.505	0.033	8.083	0.533
490	1.464	0.683	0.986	0.584	3.293	1.630	0.829	0.044	0.569	0.030	9.385	0.840
491	1.470	0.641	1.000	0.551	3.194	1.675	0.911	0.039	0.627	0.028	11.536	1.513
492	1.478	0.602	1.014	0.520	3.088	1.709	0.983	0.034	0.679	0.025	15.677	3.460
493	1.488	0.566	1.029	0.492	2.978	1.728	1.049	0.031	0.727	0.023	25.045	13.190
494	1.499	0.533	1.045	0.465	2.865	1.733	1.107	0.028	0.772	0.021	-11.797	45.178
495	1.510	0.502	1.060	0.441	2.752	1.724	1.160	0.025	0.813	0.020	-15.100	7.805
496	1.523	0.473	1.076	0.418	2.643	1.700	1.209	0.023	0.851	0.018	-7.903	2.552
497	1.536	0.446	1.091	0.397	2.540	1.663	1.253	0.021	0.886	0.017	-4.605	1.242
498	1.549	0.422	1.107	0.378	2.446	1.615	1.294	0.020	0.920	0.016	-2.758	0.747
499	1.563	0.399	1.122	0.360	2.360	1.558	1.331	0.018	0.950	0.015	-1.545	0.526
500	1.576	0.378	1.137	0.343	2.285	1.494	1.366	0.017	0.980	0.014	-0.612	0.458
501	1.590	0.358	1.152	0.327	2.220	1.425	1.398	0.016	1.007	0.013	0.314	0.667
502	1.603	0.340	1.166	0.313	2.165	1.353	1.429	0.015	1.033	0.013	0.170	2.521
503	1.617	0.323	1.181	0.299	2.121	1.281	1.457	0.014	1.057	0.012	-0.842	0.687
504	1.630	0.308	1.195	0.286	2.085	1.208	1.483	0.013	1.080	0.011	-0.158	0.271
505	1.643	0.293	1.208	0.274	2.058	1.137	1.508	0.012	1.102	0.011	0.245	0.168
506	1.656	0.279	1.222	0.263	2.038	1.068	1.531	0.011	1.123	0.010	0.526	0.123
507	1.668	0.267	1.235	0.253	2.025	1.002	1.553	0.011	1.143	0.010	0.741	0.096

508	1.680	0.255	1.248	0.243	2.017	0.940	1.574	0.010	1.162	0.009	0.914	0.079
509	1.692	0.244	1.260	0.234	2.014	0.880	1.593	0.010	1.180	0.009	1.059	0.067
510	1.704	0.234	1.272	0.225	2.014	0.825	1.612	0.009	1.197	0.008	1.182	0.057
511	1.715	0.224	1.284	0.217	2.018	0.772	1.630	0.009	1.214	0.008	1.289	0.050
512	1.726	0.215	1.296	0.209	2.025	0.724	1.647	0.008	1.229	0.008	1.383	0.044
513	1.737	0.206	1.307	0.202	2.034	0.679	1.663	0.008	1.245	0.007	1.465	0.039
514	1.748	0.198	1.318	0.195	2.044	0.636	1.678	0.007	1.259	0.007	1.539	0.035
515	1.758	0.191	1.329	0.188	2.056	0.598	1.693	0.007	1.273	0.007	1.606	0.032
516	1.768	0.183	1.339	0.182	2.068	0.561	1.707	0.007	1.287	0.007	1.666	0.029
517	1.777	0.177	1.349	0.176	2.082	0.528	1.720	0.007	1.300	0.006	1.720	0.026
518	1.787	0.170	1.359	0.171	2.096	0.497	1.733	0.006	1.312	0.006	1.770	0.024
519	1.796	0.164	1.369	0.166	2.110	0.469	1.745	0.006	1.325	0.006	1.816	0.022
520	1.805	0.159	1.378	0.161	2.125	0.442	1.757	0.006	1.336	0.006	1.858	0.020
521	1.814	0.153	1.388	0.156	2.139	0.418	1.769	0.006	1.348	0.006	1.897	0.019
522	1.822	0.148	1.397	0.151	2.153	0.395	1.780	0.005	1.359	0.005	1.933	0.017
523	1.831	0.143	1.405	0.147	2.168	0.374	1.790	0.005	1.369	0.005	1.966	0.016
524	1.839	0.139	1.414	0.143	2.182	0.354	1.800	0.005	1.380	0.005	1.997	0.015
525	1.847	0.135	1.422	0.139	2.196	0.336	1.810	0.005	1.389	0.005	2.026	0.014
526	1.854	0.130	1.431	0.135	2.209	0.319	1.820	0.005	1.399	0.005	2.054	0.013
527	1.862	0.126	1.439	0.132	2.223	0.303	1.829	0.005	1.409	0.005	2.079	0.012
528	1.869	0.123	1.446	0.128	2.236	0.289	1.838	0.004	1.418	0.005	2.103	0.012
529	1.876	0.119	1.454	0.125	2.249	0.275	1.846	0.004	1.427	0.004	2.126	0.011
530	1.883	0.116	1.462	0.122	2.261	0.262	1.855	0.004	1.435	0.004	2.147	0.010
531	1.890	0.112	1.469	0.119	2.273	0.250	1.863	0.004	1.444	0.004	2.168	0.010
532	1.897	0.109	1.476	0.116	2.285	0.239	1.871	0.004	1.452	0.004	2.187	0.009
533	1.903	0.106	1.483	0.113	2.296	0.228	1.878	0.004	1.460	0.004	2.205	0.009
534	1.909	0.103	1.490	0.110	2.307	0.219	1.886	0.004	1.468	0.004	2.222	0.008
535	1.916	0.101	1.497	0.108	2.318	0.209	1.893	0.004	1.475	0.004	2.239	0.008
536	1.922	0.098	1.503	0.105	2.329	0.201	1.900	0.003	1.483	0.004	2.254	0.008
537	1.927	0.096	1.510	0.103	2.339	0.192	1.907	0.003	1.490	0.004	2.269	0.007
538	1.933	0.093	1.516	0.101	2.349	0.185	1.913	0.003	1.497	0.003	2.283	0.007
539	1.939	0.091	1.522	0.098	2.358	0.177	1.920	0.003	1.504	0.003	2.297	0.007
540	1.944	0.089	1.528	0.096	2.368	0.171	1.926	0.003	1.511	0.003	2.310	0.006
541	1.950	0.087	1.534	0.094	2.377	0.164	1.932	0.003	1.517	0.003	2.322	0.006
542	1.955	0.084	1.540	0.092	2.386	0.158	1.938	0.003	1.524	0.003	2.334	0.006
543	1.960	0.083	1.546	0.090	2.394	0.152	1.944	0.003	1.530	0.003	2.346	0.006
544	1.965	0.081	1.551	0.088	2.402	0.147	1.950	0.003	1.536	0.003	2.357	0.005
545	1.970	0.079	1.557	0.087	2.411	0.141	1.955	0.003	1.542	0.003	2.367	0.005
546	1.975	0.077	1.562	0.085	2.418	0.137	1.960	0.003	1.548	0.003	2.377	0.005
547	1.980	0.075	1.568	0.083	2.426	0.132	1.966	0.003	1.554	0.003	2.387	0.005
548	1.984	0.074	1.573	0.082	2.433	0.127	1.971	0.003	1.560	0.003	2.396	0.005
549	1.989	0.072	1.578	0.080	2.441	0.123	1.976	0.002	1.565	0.003	2.405	0.004
550	1.994	0.071	1.583	0.079	2.447	0.119	1.981	0.002	1.571	0.003	2.414	0.004
551	1.998	0.069	1.588	0.077	2.454	0.115	1.986	0.002	1.576	0.003	2.423	0.004
552	2.002	0.068	1.593	0.076	2.461	0.112	1.990	0.002	1.581	0.003	2.431	0.004
553	2.006	0.066	1.598	0.074	2.467	0.108	1.995	0.002	1.586	0.003	2.439	0.004
554	2.011	0.065	1.602	0.073	2.474	0.105	2.000	0.002	1.591	0.002	2.446	0.004
555	2.015	0.064	1.607	0.072	2.480	0.102	2.004	0.002	1.596	0.002	2.453	0.004
556	2.019	0.062	1.612	0.070	2.486	0.099	2.008	0.002	1.601	0.002	2.461	0.004
557	2.023	0.061	1.616	0.069	2.491	0.096	2.012	0.002	1.606	0.002	2.467	0.003
558	2.026	0.060	1.620	0.068	2.497	0.093	2.017	0.002	1.611	0.002	2.474	0.003
559	2.030	0.059	1.625	0.067	2.502	0.090	2.021	0.002	1.615	0.002	2.481	0.003
560	2.034	0.058	1.629	0.066	2.508	0.088	2.025	0.002	1.620	0.002	2.487	0.003
561	2.038	0.057	1.633	0.065	2.513	0.085	2.029	0.002	1.624	0.002	2.493	0.003
562	2.041	0.056	1.637	0.064	2.518	0.083	2.032	0.002	1.628	0.002	2.499	0.003
563	2.045	0.055	1.641	0.063	2.523	0.081	2.036	0.002	1.633	0.002	2.505	0.003
564	2.048	0.054	1.645	0.062	2.528	0.078	2.040	0.002	1.637	0.002	2.510	0.003
565	2.051	0.053	1.649	0.061	2.533	0.076	2.044	0.002	1.641	0.002	2.516	0.003
566	2.055	0.052	1.653	0.060	2.537	0.074	2.047	0.002	1.645	0.002	2.521	0.003
567	2.058	0.051	1.657	0.059	2.542	0.073	2.051	0.002	1.649	0.002	2.526	0.003
568	2.061	0.050	1.661	0.058	2.546	0.071	2.054	0.002	1.653	0.002	2.531	0.002
569	2.065	0.049	1.665	0.057	2.550	0.069	2.057	0.002	1.657	0.002	2.536	0.002
570	2.068	0.048	1.668	0.056	2.555	0.067	2.061	0.002	1.661	0.002	2.541	0.002
571	2.071	0.047	1.672	0.055	2.559	0.066	2.064	0.002	1.665	0.002	2.545	0.002
572	2.074	0.047	1.675	0.054	2.563	0.064	2.067	0.002	1.668	0.002	2.550	0.002
573	2.077	0.046	1.679	0.054	2.567	0.062	2.070	0.002	1.672	0.002	2.554	0.002
574	2.080	0.045	1.682	0.053	2.571	0.061	2.073	0.002	1.676	0.002	2.558	0.002
575	2.083	0.044	1.686	0.052	2.574	0.060	2.077	0.002	1.679	0.002	2.563	0.002
576	2.085	0.044	1.689	0.051	2.578	0.058	2.080	0.001	1.683	0.002	2.567	0.002
577	2.088	0.043	1.692	0.051	2.582	0.057	2.082	0.001	1.686	0.002	2.571	0.002
578	2.091	0.042	1.696	0.050	2.585	0.056	2.085	0.001	1.690	0.002	2.575	0.002
579	2.094	0.042	1.699	0.049	2.588	0.054	2.088	0.001	1.693	0.002	2.578	0.002
580	2.096	0.041	1.702	0.049	2.592	0.053	2.091	0.001	1.696	0.002	2.582	0.002
581	2.099	0.041	1.705	0.048	2.595	0.052	2.094	0.001	1.700	0.002	2.586	0.002

582	2.102	0.040	1.708	0.047	2.598	0.051	2.097	0.001	1.703	0.002	2.589	0.002
583	2.104	0.039	1.711	0.047	2.602	0.050	2.099	0.001	1.706	0.002	2.593	0.002
584	2.107	0.039	1.714	0.046	2.605	0.049	2.102	0.001	1.709	0.002	2.596	0.002
585	2.109	0.038	1.717	0.045	2.608	0.048	2.105	0.001	1.712	0.002	2.599	0.002
586	2.112	0.038	1.720	0.045	2.611	0.047	2.107	0.001	1.715	0.002	2.603	0.002
587	2.114	0.037	1.723	0.044	2.614	0.046	2.110	0.001	1.718	0.001	2.606	0.002
588	2.117	0.037	1.726	0.044	2.616	0.045	2.112	0.001	1.721	0.001	2.609	0.002
589	2.119	0.036	1.729	0.043	2.619	0.044	2.115	0.001	1.724	0.001	2.612	0.002
590	2.121	0.036	1.732	0.043	2.622	0.043	2.117	0.001	1.727	0.001	2.615	0.001
591	2.124	0.035	1.734	0.042	2.625	0.042	2.119	0.001	1.730	0.001	2.618	0.001
592	2.126	0.035	1.737	0.041	2.627	0.041	2.122	0.001	1.733	0.001	2.621	0.001
593	2.128	0.034	1.740	0.041	2.630	0.041	2.124	0.001	1.735	0.001	2.623	0.001
594	2.130	0.034	1.743	0.040	2.633	0.040	2.126	0.001	1.738	0.001	2.626	0.001
595	2.132	0.033	1.745	0.040	2.635	0.039	2.129	0.001	1.741	0.001	2.629	0.001
596	2.135	0.033	1.748	0.040	2.638	0.038	2.131	0.001	1.744	0.001	2.632	0.001
597	2.137	0.032	1.750	0.039	2.640	0.038	2.133	0.001	1.746	0.001	2.634	0.001
598	2.139	0.032	1.753	0.039	2.642	0.037	2.135	0.001	1.749	0.001	2.637	0.001
599	2.141	0.031	1.755	0.038	2.645	0.036	2.137	0.001	1.751	0.001	2.639	0.001
600	2.143	0.031	1.758	0.038	2.647	0.036	2.139	0.001	1.754	0.001	2.642	0.001
601	2.145	0.031	1.760	0.037	2.649	0.035	2.142	0.001	1.757	0.001	2.644	0.001
602	2.147	0.030	1.763	0.037	2.652	0.034	2.144	0.001	1.759	0.001	2.646	0.001
603	2.149	0.030	1.765	0.036	2.654	0.034	2.146	0.001	1.762	0.001	2.649	0.001
604	2.151	0.030	1.768	0.036	2.656	0.033	2.148	0.001	1.764	0.001	2.651	0.001
605	2.153	0.029	1.770	0.036	2.658	0.033	2.150	0.001	1.766	0.001	2.653	0.001
606	2.155	0.029	1.772	0.035	2.660	0.032	2.152	0.001	1.769	0.001	2.655	0.001
607	2.156	0.028	1.774	0.035	2.662	0.031	2.153	0.001	1.771	0.001	2.658	0.001
608	2.158	0.028	1.777	0.034	2.664	0.031	2.155	0.001	1.773	0.001	2.660	0.001
609	2.160	0.028	1.779	0.034	2.666	0.030	2.157	0.001	1.776	0.001	2.662	0.001
610	2.162	0.027	1.781	0.034	2.668	0.030	2.159	0.001	1.778	0.001	2.664	0.001
611	2.164	0.027	1.783	0.033	2.670	0.029	2.161	0.001	1.780	0.001	2.666	0.001
612	2.166	0.027	1.786	0.033	2.672	0.029	2.163	0.001	1.782	0.001	2.668	0.001
613	2.167	0.026	1.788	0.033	2.674	0.028	2.165	0.001	1.785	0.001	2.670	0.001
614	2.169	0.026	1.790	0.032	2.675	0.028	2.166	0.001	1.787	0.001	2.672	0.001
615	2.171	0.026	1.792	0.032	2.677	0.028	2.168	0.001	1.789	0.001	2.674	0.001
616	2.172	0.026	1.794	0.032	2.679	0.027	2.170	0.001	1.791	0.001	2.675	0.001
617	2.174	0.025	1.796	0.031	2.681	0.027	2.172	0.001	1.793	0.001	2.677	0.001
618	2.176	0.025	1.798	0.031	2.683	0.026	2.173	0.001	1.795	0.001	2.679	0.001
619	2.177	0.025	1.800	0.031	2.684	0.026	2.175	0.001	1.797	0.001	2.681	0.001
620	2.179	0.024	1.802	0.030	2.686	0.025	2.177	0.001	1.799	0.001	2.683	0.001
621	2.181	0.024	1.804	0.030	2.688	0.025	2.178	0.001	1.801	0.001	2.684	0.001
622	2.182	0.024	1.806	0.030	2.689	0.025	2.180	0.001	1.803	0.001	2.686	0.001
623	2.184	0.024	1.808	0.029	2.691	0.024	2.181	0.001	1.805	0.001	2.688	0.001
624	2.185	0.023	1.810	0.029	2.692	0.024	2.183	0.001	1.807	0.001	2.689	0.001
625	2.187	0.023	1.812	0.029	2.694	0.024	2.185	0.001	1.809	0.001	2.691	0.001
626	2.188	0.023	1.814	0.028	2.695	0.023	2.186	0.001	1.811	0.001	2.692	0.001
627	2.190	0.023	1.816	0.028	2.697	0.023	2.188	0.001	1.813	0.001	2.694	0.001
628	2.191	0.022	1.817	0.028	2.698	0.023	2.189	0.001	1.815	0.001	2.696	0.001
629	2.193	0.022	1.819	0.028	2.700	0.022	2.191	0.001	1.817	0.001	2.697	0.001
630	2.194	0.022	1.821	0.027	2.701	0.022	2.192	0.001	1.819	0.001	2.699	0.001
631	2.196	0.022	1.823	0.027	2.703	0.022	2.194	0.001	1.821	0.001	2.700	0.001
632	2.197	0.021	1.825	0.027	2.704	0.021	2.195	0.001	1.822	0.001	2.702	0.001
633	2.198	0.021	1.826	0.027	2.705	0.021	2.196	0.001	1.824	0.001	2.703	0.001
634	2.200	0.021	1.828	0.026	2.707	0.021	2.198	0.001	1.826	0.001	2.704	0.001
635	2.201	0.021	1.830	0.026	2.708	0.021	2.199	0.001	1.828	0.001	2.706	0.001
636	2.202	0.021	1.832	0.026	2.710	0.020	2.201	0.001	1.830	0.001	2.707	0.001
637	2.204	0.020	1.833	0.026	2.711	0.020	2.202	0.001	1.831	0.001	2.709	0.001
638	2.205	0.020	1.835	0.025	2.712	0.020	2.203	0.001	1.833	0.001	2.710	0.001
639	2.206	0.020	1.837	0.025	2.713	0.019	2.205	0.001	1.835	0.001	2.711	0.001
640	2.208	0.020	1.838	0.025	2.715	0.019	2.206	0.001	1.836	0.001	2.713	0.001
641	2.209	0.020	1.840	0.025	2.716	0.019	2.207	0.001	1.838	0.001	2.714	0.001
642	2.210	0.019	1.842	0.024	2.717	0.019	2.209	0.001	1.840	0.001	2.715	0.001
643	2.212	0.019	1.843	0.024	2.718	0.018	2.210	0.001	1.841	0.001	2.716	0.001
644	2.213	0.019	1.845	0.024	2.720	0.018	2.211	0.001	1.843	0.001	2.718	0.001
645	2.214	0.019	1.846	0.024	2.721	0.018	2.213	0.001	1.845	0.001	2.719	0.001
646	2.215	0.019	1.848	0.024	2.722	0.018	2.214	0.001	1.846	0.001	2.720	0.001
647	2.217	0.018	1.850	0.023	2.723	0.018	2.215	0.001	1.848	0.001	2.721	0.001
648	2.218	0.018	1.851	0.023	2.724	0.017	2.216	0.001	1.849	0.001	2.722	0.001
649	2.219	0.018	1.853	0.023	2.725	0.017	2.218	0.001	1.851	0.001	2.724	0.001
650	2.220	0.018	1.854	0.023	2.726	0.017	2.219	0.001	1.852	0.001	2.725	0.001
651	2.221	0.018	1.856	0.023	2.728	0.017	2.220	0.001	1.854	0.001	2.726	0.001
652	2.223	0.018	1.857	0.022	2.729	0.016	2.221	0.001	1.855	0.001	2.727	0.001
653	2.224	0.017	1.859	0.022	2.730	0.016	2.222	0.001	1.857	0.001	2.728	0.001
654	2.225	0.017	1.860	0.022	2.731	0.016	2.223	0.001	1.858	0.001	2.729	0.001
655	2.226	0.017	1.861	0.022	2.732	0.016	2.225	0.001	1.860	0.001	2.730	0.001

656	2.227	0.017	1.863	0.022	2.733	0.016	2.226	0.001	1.861	0.001	2.731	0.001
657	2.228	0.017	1.864	0.021	2.734	0.016	2.227	0.001	1.863	0.001	2.732	0.001
658	2.229	0.017	1.866	0.021	2.735	0.015	2.228	0.001	1.864	0.001	2.733	0.001
659	2.230	0.016	1.867	0.021	2.736	0.015	2.229	0.001	1.866	0.001	2.734	0.001
660	2.231	0.016	1.869	0.021	2.737	0.015	2.230	0.001	1.867	0.001	2.735	0.001
661	2.233	0.016	1.870	0.021	2.738	0.015	2.231	0.001	1.868	0.001	2.736	0.000
662	2.234	0.016	1.871	0.021	2.739	0.015	2.232	0.001	1.870	0.001	2.737	0.000
663	2.235	0.016	1.873	0.020	2.740	0.014	2.233	0.001	1.871	0.001	2.738	0.000
664	2.236	0.016	1.874	0.020	2.741	0.014	2.235	0.001	1.872	0.001	2.739	0.000
665	2.237	0.016	1.875	0.020	2.742	0.014	2.236	0.001	1.874	0.001	2.740	0.000
666	2.238	0.015	1.877	0.020	2.743	0.014	2.237	0.001	1.875	0.001	2.741	0.000
667	2.239	0.015	1.878	0.020	2.743	0.014	2.238	0.001	1.876	0.001	2.742	0.000
668	2.240	0.015	1.879	0.020	2.744	0.014	2.239	0.001	1.878	0.001	2.743	0.000
669	2.241	0.015	1.881	0.019	2.745	0.014	2.240	0.001	1.879	0.001	2.744	0.000
670	2.242	0.015	1.882	0.019	2.746	0.013	2.241	0.001	1.880	0.001	2.745	0.000
671	2.243	0.015	1.883	0.019	2.747	0.013	2.242	0.000	1.882	0.001	2.746	0.000
672	2.244	0.015	1.884	0.019	2.748	0.013	2.243	0.000	1.883	0.001	2.747	0.000
673	2.245	0.015	1.886	0.019	2.749	0.013	2.244	0.000	1.884	0.001	2.748	0.000
674	2.246	0.014	1.887	0.019	2.750	0.013	2.245	0.000	1.886	0.001	2.748	0.000
675	2.247	0.014	1.888	0.019	2.750	0.013	2.246	0.000	1.887	0.001	2.749	0.000
676	2.248	0.014	1.889	0.018	2.751	0.013	2.247	0.000	1.888	0.001	2.750	0.000
677	2.249	0.014	1.890	0.018	2.752	0.012	2.248	0.000	1.889	0.001	2.751	0.000
678	2.249	0.014	1.892	0.018	2.753	0.012	2.248	0.000	1.890	0.001	2.752	0.000
679	2.250	0.014	1.893	0.018	2.754	0.012	2.249	0.000	1.892	0.001	2.753	0.000
680	2.251	0.014	1.894	0.018	2.754	0.012	2.250	0.000	1.893	0.001	2.753	0.000
681	2.252	0.014	1.895	0.018	2.755	0.012	2.251	0.000	1.894	0.001	2.754	0.000
682	2.253	0.014	1.896	0.018	2.756	0.012	2.252	0.000	1.895	0.001	2.755	0.000
683	2.254	0.013	1.898	0.017	2.757	0.012	2.253	0.000	1.896	0.001	2.756	0.000
684	2.255	0.013	1.899	0.017	2.758	0.012	2.254	0.000	1.898	0.001	2.757	0.000
685	2.256	0.013	1.900	0.017	2.758	0.011	2.255	0.000	1.899	0.001	2.757	0.000
686	2.257	0.013	1.901	0.017	2.759	0.011	2.256	0.000	1.900	0.001	2.758	0.000
687	2.258	0.013	1.902	0.017	2.760	0.011	2.257	0.000	1.901	0.001	2.759	0.000
688	2.258	0.013	1.903	0.017	2.761	0.011	2.257	0.000	1.902	0.001	2.760	0.000
689	2.259	0.013	1.904	0.017	2.761	0.011	2.258	0.000	1.903	0.001	2.760	0.000
690	2.260	0.013	1.905	0.017	2.762	0.011	2.259	0.000	1.904	0.001	2.761	0.000
691	2.261	0.013	1.907	0.016	2.763	0.011	2.260	0.000	1.905	0.001	2.762	0.000
692	2.262	0.013	1.908	0.016	2.763	0.011	2.261	0.000	1.907	0.001	2.762	0.000
693	2.263	0.012	1.909	0.016	2.764	0.011	2.262	0.000	1.908	0.001	2.763	0.000
694	2.263	0.012	1.910	0.016	2.765	0.010	2.263	0.000	1.909	0.001	2.764	0.000
695	2.264	0.012	1.911	0.016	2.765	0.010	2.263	0.000	1.910	0.001	2.765	0.000
696	2.265	0.012	1.912	0.016	2.766	0.010	2.264	0.000	1.911	0.001	2.765	0.000
697	2.266	0.012	1.913	0.016	2.767	0.010	2.265	0.000	1.912	0.001	2.766	0.000
698	2.267	0.012	1.914	0.016	2.767	0.010	2.266	0.000	1.913	0.001	2.767	0.000
699	2.267	0.012	1.915	0.016	2.768	0.010	2.267	0.000	1.914	0.001	2.767	0.000
700	2.268	0.012	1.916	0.015	2.769	0.010	2.267	0.000	1.915	0.001	2.768	0.000



## VII. References

- [1] D. S. Middlemiss, D. Portinari, C. P. Grey, C. A. Morrison and C. C. Wilson, *Phys. Rev. B* **81**, 184410 (2010)
- [2] F. Pascale, C.M. Zicovich-Wilson, F. Lopez, B. Civalleri, R. Orlando and R. Dovesi, *J. Comput. Chem.* **25**, 888 (2004)
- [3] C.M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, C. Roetti, V.R. Saunders, R. Orlando and R. Dovesi, *J. Comput. Chem.* **25**, 1873 (2004)
- [4] M. Born and K. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Clarendon Press, Oxford (1954)
- [5] C. M. Zicovich-Wilson, R. Dovesi, and V. R. Saunders, *J. Chem. Phys.* **115**, 9708 (2001)
- [6] M. Ferrero, M. Rérat, R. Orlando and R. Dovesi, *J. Comput. Chem.* **29**, 1450 (2008)
- [7] M. Ferrero, M. Rérat, R. Orlando and R. Dovesi, *J. Chem. Phys.* **128**, 014110 (2008)
- [8] M. Ferrero, M. Rérat, B. Kirtman and R. Dovesi, *J. Chem. Phys.* **129**, 244110 (2008)
- [9] M. De La Pierre, R. Orlando, L. Maschio, K. Doll, P. Ugliengo and R. Dovesi, *J. Comput. Chem* **32**, 1775 (2011)
- [10] Y. Noël, M. De La Pierre, L. Maschio, M. Rérat, C. M. Zicovich-Wilson and R. Dovesi, *Int. J. Quantum Chem.* **112**, 2098 (2012)
- [11] W. Kosaka, K. Nomura, K. Hashimoto and S. Ohkoshi, *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 8590 (2005)