

NATIONAL INSTITUTE FOR FUSION SCIENCE

Partial Electronic Straggling Cross Sections of Atoms for Protons

T. Kaneko

(Received — Dec. 22, 1989)

NIFS-DATA-3

Mar. 1990

RESEARCH REPORT NIFS DATA Series

This report was prepared as a preprint of compilation of evaluated atomic, molecular, plasma-wall interaction, or nuclear data for fusion research, performed as a collaboration research of the Data and Planning Center, the National Institute for Fusion Science (NIFS) of Japan. This document is intended for future publication in a journal or data book after some rearrangements of its contents.

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to the Research Information Center, National Institute for Fusion Science, Nagoya 464-01, Japan.

Partial Electronic Straggling Cross Sections of Atoms for Protons

T. Kaneko

(Received — Dec. 22, 1989)

NIFS-DATA-3

Mar. 1990

PARTIAL ELECTRONIC STRAGGLING CROSS SECTIONS OF ATOMS FOR PROTONS

Toshiaki Kaneko *)

National Institute for Fusion Science

Nagoya 464-01, Japan

Based on a newly developed wave packet theory, the partial and total electronic straggling cross sections for protons in collisions with atoms with atomic number Z_2 ranging from 2(He) to 54 (Xe) are calculated shell by shell.

[Keywords ; electronic straggling, partial cross section, total cross sections, proton, wave packet theory]

*)Permanent address:

Faculty of Science, Okayama University of Science

Ridai-cho 1-1, Okayama 700, Japan

The energy loss of energetic charged particles has reviewed wide attention in plasma-wall interactions and ion-beam material interactions since it has been a fundamental problem on the plasma-cooling and on the analysis of the composition and the location of impurity atoms in the host material. The energy spread around the average kinetic energy lost, i.e., the energy straggling, is related to the efficiency of energy transfer in the plasma and to the limits of spatial resolution of detecting impurity atoms. The energy straggling is caused by statistical fluctuations in the collision process that particles are subjected to during the passage of a plasma or a material.

So far several theories have been developed on the energy straggling. Bohr[1] derived the straggling formula for a particle with atomic number Z_1 and velocity v penetrating a target material with atomic number Z_2 :

$$(\Omega_B)^2 = 4\pi Z_1^2 Z_2 e^4 N x \quad (1)$$

where N and x denote the number density of target atoms and the path length of the particle, respectively. This formula is valid in the high velocity region. In order to apply eq.(1) for lower velocities, Lindhard and Scharff (LS) have extended the above formula by multiplying the velocity-depending factor[2]. According to them,

$$\Omega^2 / (\Omega_B)^2 = \begin{cases} (1/2)L(y) & \text{for } y < 3 \\ 1 & \text{for } y > 3 \end{cases} \quad (2)$$

where the variable y is defined by $y=(1/Z_2)(v/v_0)^2$ ($v_0 = 2.18 \times 10^8$ cm/s) and the function $L(y)=1.36y^{1/2} - 0.016y^{3/2}$. In addition, refinements of the LS theory[3], the Hartree-Fock calculation, the local-electron-density-model (LEDM) calculations[4,5] and other contributions, e.g., the charge state fluctuation[6,7], have been presented.

Recently the wave-packet theory was developed to investigate the energy loss of charged particles[8-10]. The results on the electronic stopping cross sections of atoms for a proton were in good agreement with the data. Then we have applied this theory to the estimation of electronic straggling cross sections for a proton colliding with atoms. The wave-packet theory regards the target electron system as an interacting electron gas. Hereby, one can study the dielectric response and discuss many-body effect. The partial electronic straggling cross sections of atoms have been evaluated shell by shell on the independent shell model. This report is to present a series of tables of theoretical values of the partial as well as total electronic straggling cross sections for protons in collisions with neutral target atoms. Hereafter, m , e , a_0 , and \hbar denote the electron rest mass, the elementary charge, the Bohr radius, and the Planck constant divided by 2π , respectively.

According to the wave packet theory[8], the RPA (Random Phase Approximation[11]) dielectric function of the electronic shell considered can be expressed by the reduced variables $z=k/2\bar{q}$ and $u=m\omega /k\hbar\bar{q}$ instead of usual variables k and ω as follows:

$$\epsilon(z,u) = 1 + \chi^2 / z^2 [f_1(z,u) + i f_2(z,u)] , \quad (3)$$

$$f_1(z, u) = (\pi)^{1/2} / (4z) [G(u+z) - G(u-z)] , \quad (4)$$

$$f_2(z, u) = \pi / (8z) [\exp\{ -(u-z)^2 \} - \exp\{ -(u+z)^2 \}] , \quad (5)$$

$$G(y) = y \exp(-y^2) \Phi(1/2, 3/2, y^2) , \quad (6)$$

in the framework of the linear response theory. Here, the characteristic wave number \bar{q} for an atomic shell is defined by $\bar{q} = (N_s)^{1/3} \times q_1$, where q_1 is determined from the one-electron Hartree-Fock form factor[12,13] at the origin, $f_{HF}(0)$, by $q_1 = [\{ f_{HF}(0) \}^{-2/3} / \pi]^{1/2}$. In equations (3) and (6), $\chi^2 = mv_0 / (\pi \hbar \bar{q})$ and $\Phi(1/2, 3/2, y^2)$ denotes a degenerate hypergeometric function[14]. Note that our dielectric function $\epsilon(k, \omega)$ satisfies the sum rules:

$$\int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{Im}\{ \epsilon(k, \omega) \} = \pi \omega_p^2 / 2 , \quad (7)$$

$$\int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{Im}\{ \epsilon^{-1}(k, \omega) \} = -\pi \omega_p^2 / 2 , \quad (8)$$

in which $\omega_p = (4\pi \rho e^2 / m)^{1/2}$ denotes the plasma frequency for a shell considered and ρ is the characteristic electron density of the shell of interest. According to the dielectric function method, the straggling Ω^2 of a single shell for an ion with charge $Z_1 e$ moving at velocity v on a straight-line trajectory is calculated as

$$\Omega^2 = 4\pi (Z_1 e^2)^2 / mv^2 L_1 N x , \quad (9)$$

$$L_1 = -16 / (\pi^{7/2} \chi^6) \int_0^\infty dz z^2 \int_0^{v/\bar{v}} du u^2 \operatorname{Im}\{ \epsilon^{-1}(z, u) - 1 \} , \quad (10)$$

where $\bar{v} = \hbar \bar{q} / m$.

In our case, the collective excitation has the dispersion relation in the region of $k \ll \bar{q}$:

$$\omega^2 = \omega_p^2 + (3/2)\bar{v}^2 k^2 + (\hbar k^2 / 2m)^2 \quad . \quad (11)$$

At low velocities, the straggling Ω^2 has the form

$$\Omega^2 / (N x) = 4(\pi)^{1/2} (Z_1 e^2)^2 (\pi \chi^2)^2 N_i (v/v_0)^2 \times \int_0^\infty dt t^{3/2} \exp(-t) / [t + (\pi^{1/2} \chi^2 / 2) \exp(-t) \Phi(1/2, 3/2; t)]^2 \quad (12)$$

which is proportional to the kinetic energy of an ion. On the other hand, at high velocities the straggling Ω^2 is reduced to

$$\Omega^2 = 4\pi (Z_1 e^2)^2 N_i N x, \quad (13)$$

where N_i denotes the number of the bound electrons in the i -th shell of the target atom. Note that apart from the case of the stopping-power calculation, the contribution of the plasma excitation mode is negligible[3].

In order to calculate the partial straggling, the \bar{q} values are determined for each atomic shell by N_i and q_i values. These values are included in the tables of the straggling of each element. First, it is remarked that in our case there isn't any characteristic surface like the Fermi surface in the momentum space, as

shown in fig.1. Therefore the collective excitation has a finite life time except for that in the region of small z and large u in z - u space. In order to show this character more clearly, the real and imaginary parts of our dielectric function are drawn in fig.2(a) and (b), respectively.

Figure 3 shows partial and total straggling cross section of Ne for a proton at energies ranging from 1 keV/amu to 10^4 keV/amu. One can find that the total straggling values are in a quite good agreement with the data[3] though there are not so much data. The states are classified independently by sets of principal and angular-momentum quantum numbers. It should be added that the wave packet theory can also predict the Z_2 (target atomic number) oscillations of the electronic straggling cross sections for protons[15].

In summary, the wave packet treatment is a method to evaluate the straggling as well as the electronic stopping, based on the one-shell dielectric function. This theory displayed the velocity dependences of the straggling consistent with the previously presented theories at low and high velocities. A new type of the one-shell RPA dielectric function was applied to estimate the electronic straggling on the basis of the independent shell model. In the framework of linear response, the formalism presented could be straightforwardly extended to the evaluation of electronic stoppings and stragglings for heavier ions.

The author would like to express sincere thanks to Dr. H. Tawara of National Institute for Fusion Science for useful comments on the manuscript and encouragement during preparation. He

also thanks Prof. Y. Yamamura for useful discussions and Mr. S. Watanabe, M. Tokuhiko, Y. Imanaka, T. Inamori, Y. Ohnishi, H. Katayama, and S. Nakano for making tables of data. This work was supported in part by National Institute for Fusion Science and by the Special Project Research on Ion Beam Interactions with Solids from Ministry of Education, Science, and Culture, Japan.

REFERENCES

- [1]. N. Bohr, K.Dan.Vidensk.Selsk.Mat.Fys.Medd. 18, no.8(1948).
- [2]. J. Lindhard and M. Scharff, K.Dan.Vidensk.Selsk.Mat.Fys. Medd. 27, no.15(1953).
- [3]. E. Bonderup and P. Hvelplund, Phys.Rev. A4,562(1971).
- [4]. W.K. Chu, Phys.Rev. A13,2057(1976).
- [5]. T. Kaneko and Y. Yamamura, Phys.Rev. A33,1653(1986).
- [6]. F. Besenbacher, J.U. Andersen, and E. Bonderup, Nucl.Instr. Meth. 168,1(1980).
- [7]. Toshiaki Kaneko, Nucl.Instr.Meth. in Phys.Res.B33,151(1988).
- [8]. Toshiaki Kaneko, Phys.Rev.A40, 2188(1989), and Phys.Stat. Sol.(b)(1989)(in print).
- [9]. Toshiaki Kaneko, Nucl.Instr.Meth. in Phys.Res.B33,147(1988).
- [10]. Toshiaki Kaneko, IPPJ-AM63(Nagoya University)(1989); IPPJ-901(Nagoya University)(1989).
- [11]. D. Pines, 'Elementary excitations in solids'(Benjamin,1964).
- [12]. E. Clementi and C. Roetti, At.Data and Nucl.Data Tables 14,177(1974).
- [13]. A.D. McLean and R.S. McLean, At.Data and Nucl.Data Tables 26,197(1981).
- [14]. I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, 'Table of Integrals, Series, and Products'(Academic Press, 1980).
- [15]. Toshiaki Kaneko, (to be submitted).

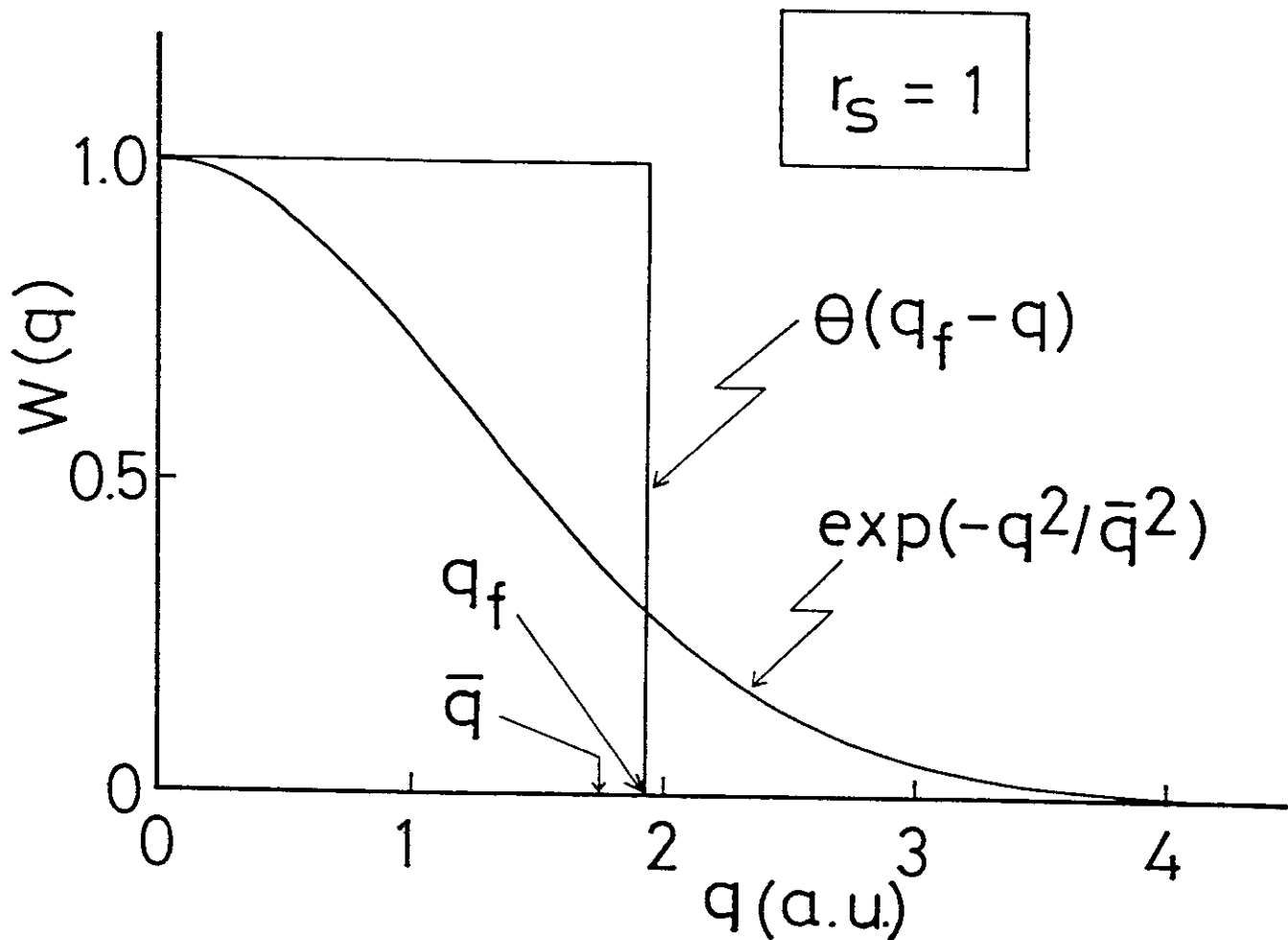


Figure 1:

The momentum distribution used in comparison with the Fermi-Dirac distribution function for $r_s=1$, where $\bar{q} = 1.745$ and $q_f = 1.919$ in atomic units. $\theta(x)$ is the step function.

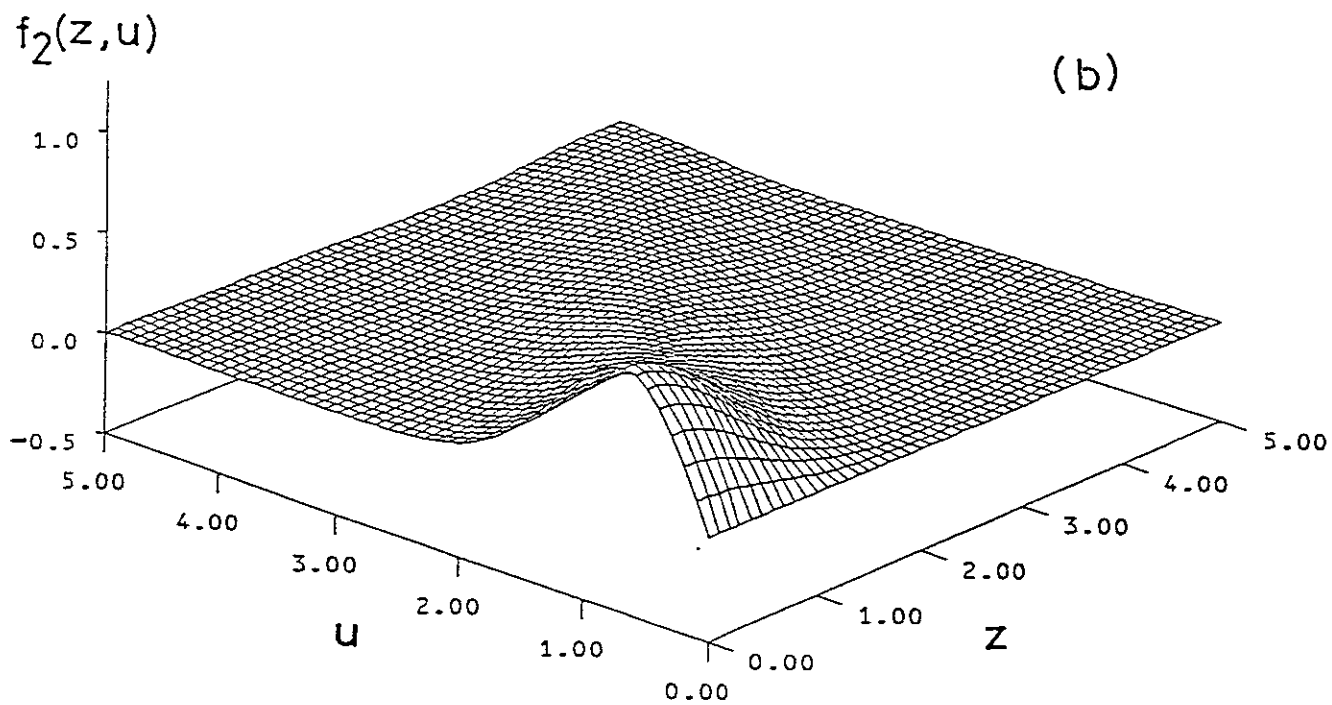
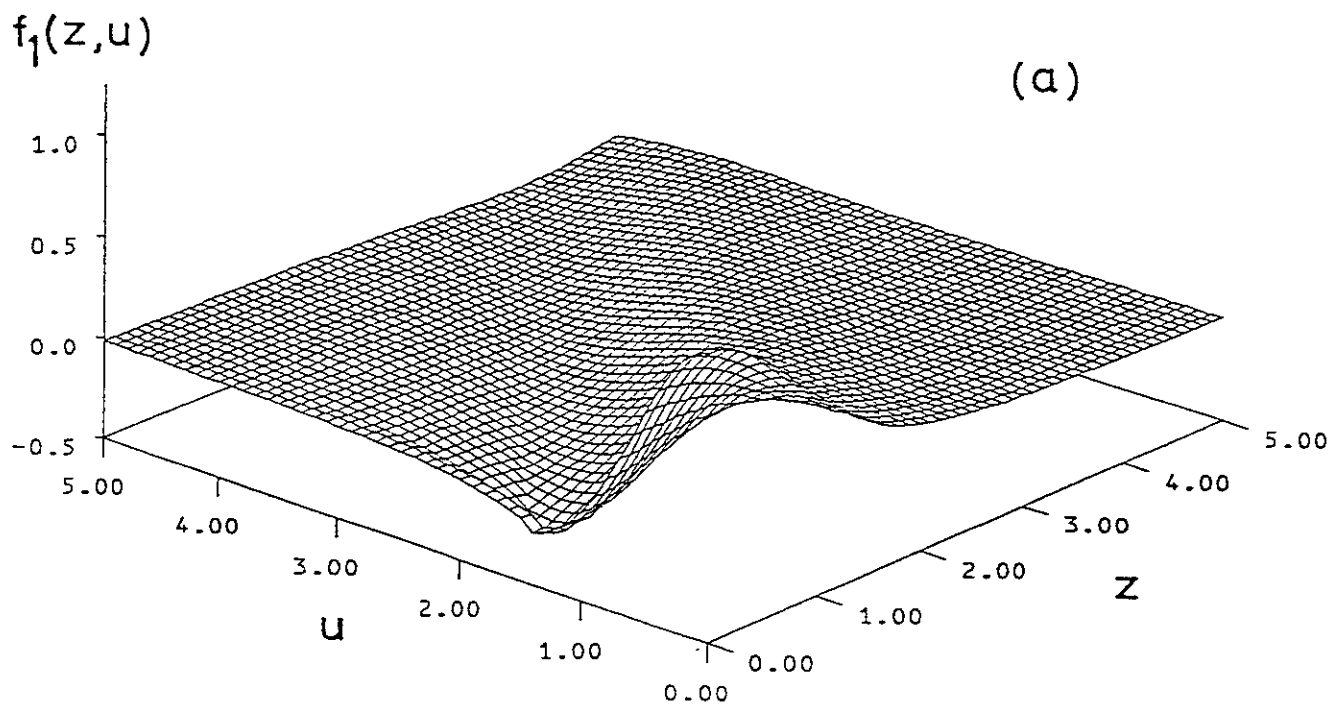


Figure 2(a) and(b):

(a) $f_1(z,u)$ and (b) $f_2(z,u)$ included in the real and imaginary part of the present one-shell dielectric function.

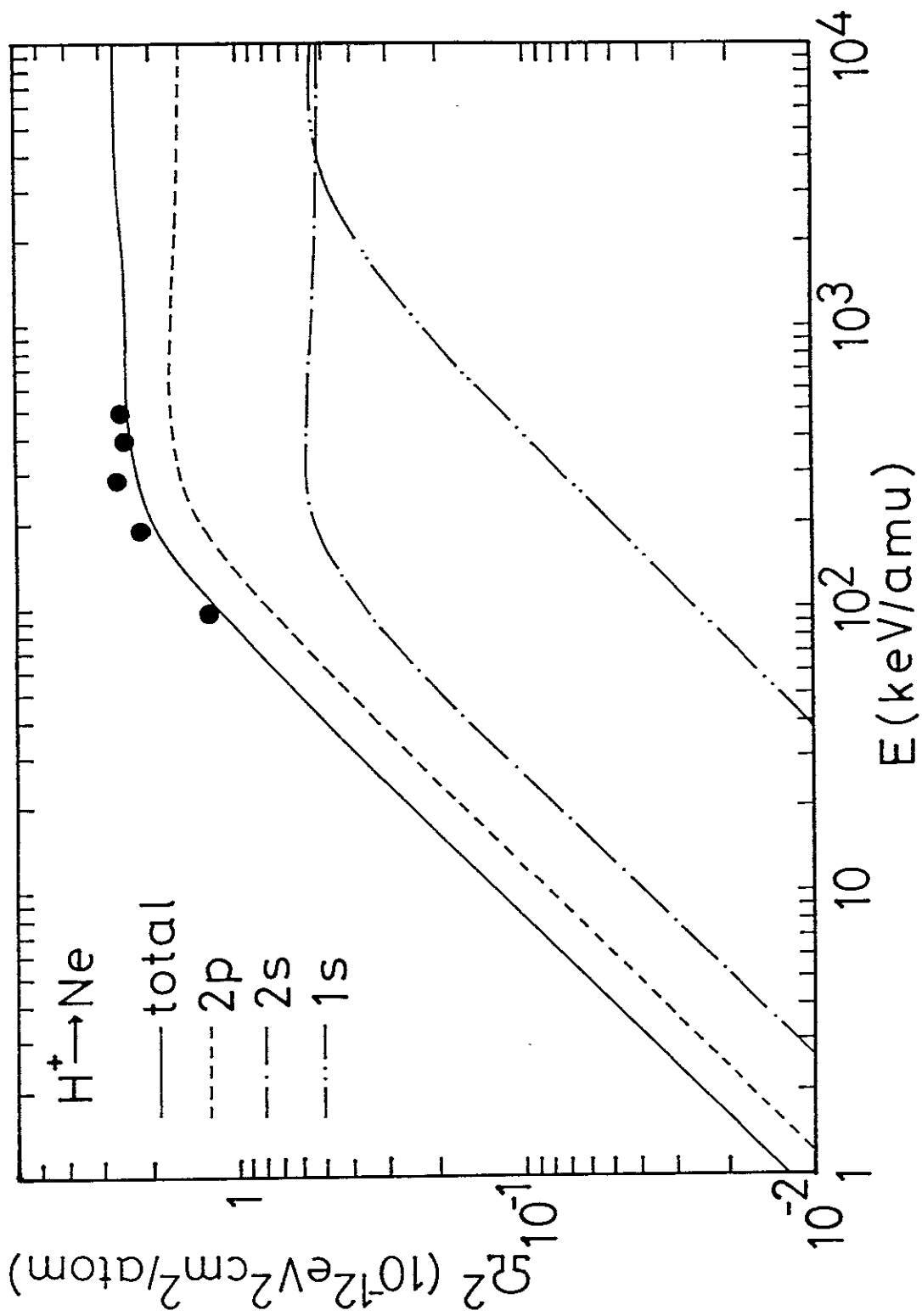


Figure 3:

Calculated total and partial straggling cross sections of Ne for protons together with the data: ● - [3]

EXPLANATION OF TABLES

- ① Symbol of a target element.
- ② Electronic state and the number of electrons, N_1 , in each state.
- ③ The value of the parameter q_1 for each electronic state in atomic units.
- ④ Proton velocity v in units of the Bohr velocity $v_0 = 2.18 \times 10^8$ cm/sec. $v=1$ corresponds to the kinetic energy $E = 25$ keV/amu.
- ⑤ Straggling cross sections in units of 10^{-12} $\text{ev}^2 \text{cm}^2/\text{atom}$. A symbol $a(b)$ means $a \times 10^b$.

①	C	1s(2)2s(2)2p(2)	②	③	④	⑤
				q_1	v	
			0.642	3.268		0.5725
			2s(2)	total		2p(2)
			0.00960	0.0217	0.2	0.0115
			0.0393	0.0891	0.4	0.0472
			0.0902	0.205	0.6	0.109
			0.163	0.00598	0.8	0.197
			0.253	0.0106	1.0	0.304
			0.353	0.0166	1.2	0.414
			0.446	0.0239	1.4	0.502
			0.517	0.0324	1.6	0.557
			0.561	0.0422	1.8	0.583
			0.583	0.0532	2.0	0.596
			0.593	0.0653	2.2	0.592
			0.590	0.0786	2.4	0.586
			0.585	0.0930	2.6	0.580
			0.580	0.108	2.8	0.576
			0.576	0.125	3.0	0.572
			0.572	0.142	3.2	0.570
			0.569	0.160	3.4	0.563
			0.567	0.178	3.6	0.560
			0.562	0.198	3.8	0.558
			0.559	0.217	4.0	0.555
			0.550	0.237	5	0.545
			0.543	0.338	6	0.539
			0.538	0.428	7	0.535
			0.534	0.494	8	0.532
			0.532	0.534	9	0.530
			0.529	0.553	10	0.528
			0.526	0.561	12	0.526
			0.525	0.565	14	0.524
			0.524	0.562	16	0.523
			0.523	0.557	18	0.523
			0.523	0.553	20	0.523
			0.523	0.549		0.522

<u>He 1s(2)</u>			<u>Li 1s(2)2s(1)</u>			<u>Be 1s(2)2s(2)</u>		
q _l	total	0.9383	q _l	total	1.559	q _l	total	2.116
v	total	1s(2)	v	total	1s(2)	v	total	1s(2)
0.2	0.00527	0.00527	0.2	0.00868	0.00233	0.2	0.0220	0.00140
0.4	0.0214	0.0214	0.4	0.0354	0.00925	0.4	0.0932	-0.00559
0.6	0.0485	0.0485	0.6	0.0818	0.0210	0.6	0.221	0.0125
0.8	0.0866	0.0866	0.8	0.147	0.0374	0.8	0.389	0.0224
1.0	0.136	0.136	1.0	0.227	0.0583	1.0	0.541	0.0349
1.2	0.194	0.194	1.2	0.308	0.0837	1.2	0.626	0.0501
1.4	0.260	0.260	1.4	0.378	0.113	1.4	0.664	0.0680
1.6	0.328	0.328	1.6	0.434	0.147	1.6	0.678	0.0883
1.8	0.395	0.395	1.8	0.479	0.184	1.8	0.692	0.111
2.0	0.455	0.455	2.0	0.521	0.223	2.0	0.710	0.136
2.2	0.504	0.504	2.2	0.559	0.264	2.2	0.730	0.163
2.4	0.540	0.540	2.4	0.598	0.306	2.4	0.753	0.191
2.6	0.564	0.564	2.6	0.636	0.348	2.6	0.778	0.221
2.8	0.579	0.579	2.8	0.674	0.388	2.8	0.805	0.251
3.0	0.582	0.582	3.0	0.709	0.425	3.0	0.833	0.282
3.2	0.582	0.582	3.2	0.740	0.459	3.2	0.861	0.313
3.4	0.581	0.581	3.4	0.768	0.488	3.4	0.889	0.344
3.6	0.579	0.579	3.6	0.791	0.513	3.6	0.917	0.374
3.8	0.576	0.576	3.8	0.810	0.533	3.8	0.943	0.402
4.0	0.574	0.574	4.0	0.823	0.548	4.0	0.968	0.429
5	0.562	0.562	5	0.843	0.572	5	1.059	0.525
6	0.553	0.553	6	0.839	0.571	6	1.090	0.560
7	0.547	0.547	7	0.831	0.565	7	1.096	0.568
8	0.542	0.542	8	0.824	0.559	8	1.094	0.568
9	0.539	0.539	9	0.819	0.554	9	1.090	0.564
10	0.536	0.536	10	0.814	0.550	10	1.085	0.561
12	0.532	0.532	12	0.806	0.544	12	1.076	0.554
14	0.529	0.529	14	0.801	0.539	14	1.070	0.548
16	0.527	0.527	16	0.797	0.536	16	1.065	0.543
18	0.526	0.526	18	0.794	0.533	18	1.061	0.540
20	0.525	0.525	20	0.792	0.531	20	1.058	0.537

B $1s(2)2s(2)2p(1)$				C $1s(2)2s(2)2p(2)$					
q_1	total	$1s(2)$	$2s(2)$	$2p(1)$	q_1	total	$1s(2)$	$2s(2)$	$2p(2)$
0.2	0.0261	0.933(-3)	0.0134	0.0118	0.2	0.0217	0.669(-3)	0.00960	0.0115
0.4	0.110	0.00372	0.0553	0.0507	0.4	0.0891	0.00267	0.0393	0.0472
0.6	0.258	0.00832	0.129	0.121	0.6	0.205	0.00598	0.0902	0.109
0.8	0.456	0.0148	0.233	0.208	0.8	0.370	0.0106	0.163	0.197
1.0	0.649	0.0232	0.354	0.272	1.0	0.574	0.0166	0.253	0.304
1.2	0.794	0.0333	0.467	0.294	1.2	0.790	0.0239	0.353	0.414
1.4	0.886	0.0452	0.543	0.298	1.4	0.980	0.0324	0.446	0.502
1.6	0.933	0.0587	0.581	0.293	1.6	1.116	0.0422	0.517	0.557
1.8	0.961	0.0740	0.598	0.289	1.8	1.198	0.0532	0.561	0.583
2.0	0.971	0.0907	0.595	0.285	2.0	1.244	0.0653	0.583	0.596
2.2	0.979	0.109	0.589	0.282	2.2	1.263	0.0786	0.593	0.592
2.4	0.990	0.129	0.582	0.279	2.4	1.268	0.0930	0.590	0.586
2.6	1.002	0.149	0.576	0.277	2.6	1.274	0.108	0.585	0.580
2.8	1.017	0.171	0.571	0.275	2.8	1.281	0.125	0.580	0.576
3.0	1.034	0.194	0.566	0.274	3.0	1.290	0.142	0.576	0.572
3.2	1.052	0.218	0.562	0.272	3.2	1.302	0.160	0.572	0.570
3.4	1.072	0.242	0.559	0.271	3.4	1.311	0.178	0.569	0.563
3.6	1.092	0.267	0.556	0.270	3.6	1.324	0.198	0.567	0.560
3.8	1.113	0.291	0.553	0.269	3.8	1.336	0.217	0.562	0.558
4.0	1.135	0.316	0.550	0.269	4.0	1.351	0.237	0.559	0.555
5	1.237	0.428	0.542	0.267	5	1.433	0.338	0.550	0.545
6	1.307	0.507	0.536	0.264	6	1.510	0.428	0.543	0.539
7	1.342	0.546	0.532	0.263	7	1.568	0.494	0.538	0.535
8	1.354	0.562	0.529	0.263	8	1.599	0.534	0.534	0.532
9	1.356	0.566	0.528	0.262	9	1.616	0.553	0.532	0.530
10	1.354	0.566	0.526	0.262	10	1.618	0.561	0.529	0.528
12	1.348	0.561	0.525	0.261	12	1.617	0.565	0.526	0.526
14	1.340	0.556	0.524	0.261	14	1.611	0.562	0.525	0.524
16	1.334	0.551	0.523	0.261	16	1.604	0.557	0.524	0.523
18	1.329	0.547	0.522	0.260	18	1.599	0.553	0.523	0.523
20	1.325	0.543	0.522	0.260	20	1.594	0.549	0.523	0.522

<u>N 1s(2)2s(2)2p(3)</u>				<u>O 1s(2)2s(2)2p(4)</u>					
q ₁	total	1s(2)	2s(2)	2p(3)	q ₁	total	1s(2)	2s(2)	2p(4)
0.2	0.0187	0.498(-3)	0.00721	0.0110	0.2	0.0160	0.395(-3)	0.00573	0.00983
0.4	0.0763	0.00199	0.0295	0.0448	0.4	0.0647	0.00158	0.0233	0.0398
0.6	0.174	0.00446	0.0672	0.102	0.6	0.147	0.00354	0.0529	0.0901
0.8	0.312	0.00789	0.121	0.183	0.8	0.262	0.00627	0.0946	0.161
1.0	0.488	0.0123	0.189	0.287	1.0	0.410	0.00976	0.148	0.252
1.2	0.693	0.0177	0.268	0.407	1.2	0.586	0.0140	0.212	0.361
1.4	0.909	0.0241	0.352	0.534	1.4	0.785	0.0191	0.282	0.484
1.6	1.113	0.0314	0.430	0.652	1.6	0.994	0.0249	0.355	0.615
1.8	1.283	0.0397	0.495	0.748	1.8	1.199	0.0315	0.423	0.745
2.0	1.405	0.0488	0.541	0.816	2.0	1.385	0.0388	0.481	0.865
2.2	1.484	0.0588	0.569	0.856	2.2	1.540	0.0467	0.525	0.968
2.4	1.536	0.0696	0.586	0.880	2.4	1.659	0.0554	0.556	1.048
2.6	1.551	0.0812	0.588	0.882	2.6	1.746	0.0647	0.576	1.105
2.8	1.557	0.0936	0.586	0.878	2.8	1.801	0.0747	0.583	1.143
3.0	1.563	0.107	0.582	0.873	3.0	1.828	0.0853	0.584	1.159
3.2	1.568	0.121	0.579	0.868	3.2	1.842	0.0964	0.582	1.163
3.4	1.573	0.135	0.576	0.863	3.4	1.851	0.108	0.580	1.162
3.6	1.580	0.150	0.572	0.858	3.6	1.857	0.120	0.578	1.159
3.8	1.588	0.166	0.569	0.853	3.8	1.863	0.133	0.575	1.155
4.0	1.596	0.182	0.566	0.849	4.0	1.869	0.146	0.572	1.151
5	1.652	0.266	0.554	0.831	5	1.906	0.217	0.560	1.128
6	1.717	0.350	0.547	0.820	6	1.955	0.293	0.552	1.110
7	1.778	0.425	0.541	0.812	7	2.008	0.365	0.546	1.097
8	1.826	0.483	0.537	0.806	8	2.057	0.429	0.541	1.087
9	1.857	0.521	0.535	0.802	9	2.096	0.479	0.538	1.080
10	1.874	0.544	0.532	0.798	10	2.123	0.514	0.535	1.074
12	1.883	0.561	0.529	0.793	12	2.148	0.550	0.531	1.066
14	1.881	0.564	0.527	0.790	14	2.152	0.562	0.529	1.061
16	1.875	0.562	0.526	0.788	16	2.148	0.564	0.527	1.057
18	1.869	0.558	0.524	0.787	18	2.142	0.562	0.526	1.054
20	1.864	0.555	0.524	0.785	20	2.136	0.559	0.525	1.052

F <u>1s(2)2s(2)2p(5)</u>		Ne <u>1s(2)2s(2)2p(6)</u>	
q ₁	q ₁	total	total
4.995	5.572	0.8776	1.136
1.014	1s(2)	2p(5)	2s(2)
0.00467	0.318(-3)	0.00903	0.00390
0.0189	0.00127	0.0363	0.0157
0.0427	0.00285	0.0820	0.0355
0.0762	0.00506	0.146	0.0632
0.119	0.00788	0.228	0.0987
0.171	0.0113	0.327	0.142
0.229	0.0154	0.442	0.191
0.292	0.0201	0.568	0.245
0.356	0.0254	0.703	0.302
0.416	0.0313	0.839	0.359
0.469	0.0378	0.971	0.412
0.511	0.0448	1.092	0.460
0.543	0.0524	1.197	0.500
0.565	0.0605	1.283	0.531
0.576	0.0691	1.350	0.554
0.580	0.0783	1.397	0.569
0.581	0.0879	1.424	0.575
0.580	0.0979	1.437	0.578
0.578	0.108	1.442	0.578
0.576	0.119	1.443	0.578
0.565	0.179	1.427	0.570
0.557	0.245	1.406	0.561
0.550	0.311	1.389	0.554
0.545	0.374	1.375	0.548
0.541	0.429	1.364	0.544
0.538	0.473	1.355	0.541
0.534	0.529	1.342	0.536
0.531	0.554	1.334	0.533
0.529	0.562	1.327	0.530
0.527	0.564	1.323	0.529
0.526	0.563	1.319	0.527
0.2	0.0140	0.00903	0.00821
0.4	0.0564	0.0363	0.0327
0.6	0.128	0.0820	0.0741
0.8	0.227	0.146	0.132
1.0	0.355	0.228	0.206
1.2	0.509	0.327	0.295
1.4	0.686	0.442	0.399
1.6	0.881	0.568	0.516
1.8	1.084	0.703	0.644
2.0	1.286	0.839	0.779
2.2	1.477	0.971	0.917
2.4	1.648	1.092	1.054
2.6	1.792	1.197	1.185
2.8	1.908	1.283	1.307
3.0	1.995	1.350	1.414
3.2	2.056	1.397	1.505
3.4	2.093	1.424	1.579
3.6	2.115	1.437	1.636
3.8	2.129	1.442	1.674
4.0	2.139	1.443	1.697
5	2.172	1.427	1.721
6	2.208	1.406	1.705
7	2.250	1.389	1.685
8	2.294	1.375	1.668
9	2.334	1.364	1.653
10	2.366	1.355	1.641
12	2.405	1.342	1.623
14	2.418	1.334	1.611
16	2.419	1.327	1.602
18	2.414	1.323	1.595
20	2.408	1.319	1.590

Na 1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(1)

	q1	6.121	1.312	0.2617	1.205
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(1)	2p(6)
0.2	0.0365	0.221(-3)	0.00309	0.0273	0.00586
0.4	0.168	0.885(-3)	0.0124	0.131	0.0232
0.6	0.349	0.00199	0.0280	0.266	0.0526
0.8	0.451	0.00353	0.0498	0.305	0.0936
1.0	0.524	0.00550	0.0777	0.295	0.146
1.2	0.615	0.00790	0.112	0.287	0.209
1.4	0.727	0.0107	0.151	0.282	0.284
1.6	0.854	0.0140	0.195	0.278	0.368
1.8	0.996	0.0177	0.242	0.275	0.461
2.0	1.147	0.0218	0.291	0.272	0.562
2.2	1.307	0.0264	0.341	0.271	0.669
2.4	1.469	0.0313	0.389	0.269	0.780
2.6	1.631	0.0367	0.433	0.268	0.894
2.8	1.787	0.0424	0.472	0.267	1.006
3.0	1.935	0.0485	0.504	0.266	1.116
3.2	2.071	0.0550	0.530	0.266	1.220
3.4	2.193	0.0618	0.550	0.265	1.316
3.6	2.298	0.0690	0.563	0.264	1.402
3.8	2.388	0.0766	0.570	0.264	1.478
4.0	2.462	0.0844	0.573	0.263	1.542
5	2.652	0.128	0.573	0.262	1.690
6	2.716	0.178	0.566	0.262	1.711
7	2.753	0.231	0.559	0.261	1.702
8	2.788	0.286	0.553	0.261	1.688
9	2.822	0.339	0.548	0.261	1.674
10	2.853	0.388	0.545	0.260	1.661
12	2.907	0.467	0.539	0.260	1.640
14	2.938	0.517	0.535	0.260	1.625
16	2.951	0.545	0.532	0.260	1.614
18	2.953	0.557	0.530	0.260	1.606
20	2.950	0.562	0.529	0.260	1.599

Mg 1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)

q1	6.689	1.518	0.3340	1.420	
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	2p(6)
0.2	0.0332	0.189(-3)	0.00244	0.0262	0.00445
0.4	0.142	0.755(-3)	0.00968	0.114	0.0177
0.6	0.335	0.00170	0.0220	0.272	0.0398
0.8	0.568	0.00301	0.0391	0.455	0.0710
1.0	0.742	0.00470	0.0610	0.565	0.111
1.2	0.858	0.00675	0.0876	0.605	0.159
1.4	0.940	0.00916	0.119	0.597	0.215
1.6	1.031	0.0119	0.153	0.586	0.280
1.8	1.135	0.0151	0.192	0.576	0.351
2.0	1.249	0.0186	0.233	0.568	0.430
2.2	1.374	0.0225	0.275	0.562	0.514
2.4	1.506	0.0267	0.318	0.557	0.603
2.6	1.641	0.0313	0.361	0.553	0.696
2.8	1.778	0.0362	0.401	0.549	0.792
3.0	1.914	0.0415	0.438	0.546	0.888
3.2	2.046	0.0471	0.471	0.544	0.984
3.4	2.172	0.0529	0.500	0.541	1.078
3.6	2.289	0.0591	0.523	0.539	1.168
3.8	2.398	0.0656	0.541	0.538	1.253
4.0	2.495	0.0724	0.554	0.536	1.332
5	2.816	0.110	0.573	0.530	1.603
6	2.943	0.154	0.570	0.528	1.691
7	2.999	0.202	0.564	0.526	1.707
8	3.036	0.252	0.558	0.525	1.702
9	3.070	0.302	0.553	0.524	1.691
10	3.100	0.350	0.549	0.523	1.679
12	3.159	0.433	0.543	0.522	1.657
14	3.191	0.492	0.538	0.521	1.640
16	3.212	0.529	0.535	0.521	1.627
18	3.219	0.549	0.533	0.521	1.617
20	3.219	0.559	0.531	0.520	1.609

A.1 1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2) 3p(1)

q1	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	2p(6)	3p(1)
		7.276	1.713	0.4228	1.625	0.3202
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	2p(6)	3p(1)
0.2	0.0438	0.162(-3)	0.00200	0.0183	0.00355	0.0199
0.4	0.191	0.648(-3)	0.00792	0.0769	0.0141	0.0914
0.6	0.443	0.00146	0.0180	0.182	0.0315	0.211
0.8	0.702	0.00259	0.0319	0.325	0.0564	0.287
1.0	0.907	0.00404	0.0498	0.465	0.0881	0.299
1.2	1.052	0.00580	0.0715	0.555	0.127	0.292
1.4	1.157	0.00788	0.0968	0.594	0.172	0.286
1.6	1.233	0.0103	0.126	0.593	0.223	0.282
1.8	1.314	0.0130	0.157	0.586	0.280	0.278
2.0	1.406	0.0160	0.192	0.578	0.344	0.276
2.2	1.505	0.0194	0.228	0.572	0.412	0.274
2.4	1.612	0.0230	0.266	0.566	0.485	0.272
2.6	1.725	0.0270	0.304	0.561	0.562	0.270
2.8	1.842	0.0312	0.342	0.557	0.643	0.269
3.0	1.962	0.0357	0.379	0.554	0.725	0.268
3.2	2.081	0.0405	0.414	0.551	0.809	0.267
3.4	2.200	0.0456	0.445	0.548	0.894	0.267
3.6	2.315	0.0510	0.474	0.546	0.978	0.266
3.8	2.425	0.0566	0.499	0.544	1.060	0.266
4.0	2.529	0.0625	0.519	0.542	1.140	0.265
5	2.926	0.0956	0.566	0.535	1.466	0.263
6	3.132	0.134	0.571	0.531	1.634	0.263
7	3.228	0.177	0.568	0.529	1.690	0.265
8	3.275	0.222	0.563	0.527	1.703	0.262
9	3.311	0.268	0.558	0.525	1.699	0.261
10	3.343	0.313	0.553	0.525	1.691	0.261
12	3.398	0.397	0.547	0.523	1.671	0.261
14	3.440	0.463	0.542	0.522	1.653	0.260
16	3.467	0.508	0.538	0.522	1.639	0.260
18	3.480	0.536	0.535	0.521	1.628	0.260
20	3.484	0.552	0.533	0.521	1.619	0.260

Si 1s(2)2s(2)3s(2)2p(2)3p(2)

q1	7.988	1.890	0.5014	1.797	0.3833	
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	2p(6)	3p(2)
0.2	0.0401	0.137(-3)	0.00170	0.0141	0.00300	0.0212
0.4	0.168	0.548(-3)	0.00674	0.0583	0.0120	0.0904
0.6	0.393	0.00123	0.0152	0.136	0.0266	0.215
0.8	0.700	0.00219	0.0271	0.246	0.0475	0.377
1.0	1.006	0.00341	0.0423	0.372	0.0742	0.514
1.2	1.235	0.00491	0.0607	0.483	0.107	0.580
1.4	1.384	0.00667	0.0822	0.554	0.145	0.596
1.6	1.478	0.00869	0.107	0.586	0.188	0.589
1.8	1.563	0.0110	0.134	0.601	0.237	0.580
2.0	1.635	0.0135	0.164	0.595	0.290	0.573
2.2	1.714	0.0163	0.195	0.587	0.349	0.567
2.4	1.801	0.0194	0.228	0.581	0.411	0.561
2.6	1.894	0.0228	0.263	0.575	0.478	0.557
2.8	1.993	0.0264	0.298	0.569	0.547	0.553
3.0	2.096	0.0302	0.332	0.565	0.620	0.550
3.2	2.202	0.0343	0.366	0.561	0.694	0.547
3.4	2.309	0.0387	0.398	0.557	0.770	0.545
3.6	2.415	0.0432	0.428	0.554	0.847	0.542
3.8	2.519	0.0480	0.456	0.552	0.923	0.541
4.0	2.620	0.0531	0.480	0.549	0.999	0.539
5	3.045	0.0814	0.552	0.541	1.337	0.534
6	3.306	0.115	0.569	0.536	1.558	0.530
7	3.438	0.152	0.569	0.531	1.658	0.528
8	3.505	0.192	0.566	0.530	1.693	0.526
9	3.547	0.233	0.561	0.528	1.700	0.525
10	3.579	0.275	0.557	0.526	1.697	0.524
12	3.634	0.356	0.550	0.525	1.681	0.523
14	3.679	0.425	0.544	0.523	1.664	0.522
16	3.712	0.479	0.540	0.523	1.649	0.522
18	3.732	0.515	0.537	0.522	1.637	0.521
20	3.742	0.539	0.535	0.522	1.627	0.521

P 1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)3p(3)

q _i	-----	8.467	2.083	0.5759	2.050	0.4647
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	2p(6)	3p(3)
0.2	0.0347	0.123(-3)	0.00144	0.0115	0.00238	0.0193
0.4	0.142	0.493(-3)	0.00573	0.0471	0.00951	0.0796
0.6	0.329	0.00111	0.0129	0.109	0.0213	0.185
0.8	0.594	0.00197	0.0230	0.197	0.0377	0.334
1.0	0.913	0.00307	0.0359	0.304	0.0591	0.511
1.2	1.234	0.00442	0.0515	0.413	0.0851	0.680
1.4	1.493	0.00600	0.0698	0.502	0.116	0.800
1.6	1.670	0.00783	0.0907	0.557	0.150	0.864
1.8	1.784	0.00988	0.114	0.583	0.189	0.888
2.0	1.874	0.0122	0.139	0.596	0.232	0.894
2.2	1.937	0.0147	0.167	0.592	0.279	0.884
2.4	2.004	0.0175	0.196	0.586	0.330	0.874
2.6	2.077	0.0205	0.226	0.580	0.384	0.866
2.8	2.155	0.0238	0.257	0.575	0.441	0.858
3.0	2.239	0.0272	0.289	0.571	0.501	0.851
3.2	2.326	0.0309	0.320	0.566	0.564	0.845
3.4	2.416	0.0348	0.351	0.563	0.628	0.839
3.6	2.508	0.0390	0.381	0.559	0.694	0.835
3.8	2.600	0.0433	0.410	0.557	0.760	0.831
4.0	2.692	0.0479	0.436	0.554	0.828	0.827
5	3.114	0.0735	0.530	0.544	1.153	0.813
6	3.424	0.104	0.562	0.538	1.415	0.805
7	3.617	0.138	0.569	0.534	1.577	0.799
8	3.723	0.174	0.567	0.531	1.655	0.795
9	3.786	0.213	0.564	0.529	1.687	0.793
10	3.828	0.253	0.560	0.528	1.697	0.790
12	3.888	0.331	0.553	0.525	1.691	0.788
14	3.935	0.401	0.547	0.524	1.677	0.786
16	3.970	0.457	0.543	0.523	1.662	0.784
18	3.994	0.499	0.540	0.522	1.649	0.784
20	4.008	0.527	0.537	0.522	1.639	0.783

S 1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)3p(4)

q1	-----	9.065	2.263	0.6495	2.246	0.5167
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	2p(6)	3p(4)
0.2	0.0316	0.109(-3)	0.00125	0.00942	0.00204	0.0188
0.4	0.129	0.435(-3)	0.00499	0.0385	0.00813	0.0768
0.6	0.295	0.979(-3)	0.0112	0.0885	0.0182	0.176
0.8	0.531	0.00174	0.0200	0.160	0.0322	0.318
1.0	0.828	0.00272	0.0312	0.249	0.0505	0.495
1.2	1.159	0.00390	0.0448	0.347	0.0727	0.691
1.4	1.480	0.00531	0.0607	0.439	0.0987	0.876
1.6	1.747	0.00692	0.0788	0.512	0.129	1.021
1.8	1.942	0.00874	0.0991	0.558	0.162	1.114
2.0	2.073	0.0108	0.121	0.581	0.199	1.161
2.2	2.176	0.0130	0.146	0.593	0.239	1.185
2.4	2.239	0.0155	0.171	0.590	0.283	1.180
2.6	2.302	0.0181	0.198	0.585	0.330	1.171
2.8	2.369	0.0210	0.226	0.581	0.379	1.162
3.0	2.440	0.0241	0.255	0.576	0.432	1.153
3.2	2.514	0.0274	0.284	0.572	0.486	1.144
3.4	2.592	0.0308	0.313	0.569	0.543	1.140
3.6	2.672	0.0345	0.3422	0.566	0.601	1.132
3.8	2.754	0.0383	0.370	0.562	0.661	1.124
4.0	2.837	0.0424	0.397	0.559	0.721	1.118
5	3.239	0.0653	0.502	0.548	1.026	1.097
6	3.564	0.0922	0.551	0.542	1.296	1.083
7	3.792	0.123	0.566	0.537	1.493	1.074
8	3.932	0.156	0.568	0.534	1.607	1.068
9	4.014	0.192	0.566	0.531	1.663	1.062
10	4.065	0.228	0.563	0.529	1.688	1.058
12	4.133	0.302	0.556	0.527	1.695	1.053
14	4.183	0.371	0.550	0.526	1.685	1.051
16	4.220	0.431	0.545	0.524	1.671	1.048
18	4.247	0.477	0.542	0.523	1.659	1.046
20	4.264	0.511	0.539	0.523	1.647	1.045

C 1 1s(2) 2s(2) 2p(6) 3s(2) 3p(5)

q1	-----	9.665	2.443	0.7195	2.440	0.5761
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	2p(6)	3p(5)
0.2	0.0285	0.969(-4)	0.00110	0.00801	0.00177	0.0175
0.4	0.116	0.387(-3)	0.00439	0.0327	0.00705	0.0716
0.6	0.264	0.871(-3)	0.00980	0.0748	0.0158	0.163
0.8	0.474	0.00155	0.0175	0.135	0.0279	0.293
1.0	0.742	0.00242	0.0274	0.210	0.0436	0.458
1.2	1.054	0.00348	0.0393	0.297	0.0629	0.651
1.4	1.386	0.00472	0.0533	0.385	0.0855	0.857
1.6	1.703	0.00616	0.0693	0.464	0.111	1.052
1.8	1.975	0.00778	0.0872	0.523	0.140	1.217
2.0	2.187	0.00959	0.107	0.561	0.173	1.337
2.2	2.343	0.0116	0.128	0.582	0.208	1.413
2.4	2.461	0.0138	0.151	0.590	0.246	1.460
2.6	2.534	0.0161	0.175	0.588	0.287	1.468
2.8	2.598	0.0187	0.201	0.584	0.330	1.464
3.0	2.662	0.0214	0.227	0.580	0.376	1.457
3.2	2.727	0.0244	0.253	0.577	0.424	1.449
3.4	2.796	0.0275	0.280	0.573	0.474	1.441
3.6	2.866	0.0307	0.307	0.569	0.526	1.432
3.8	2.939	0.0342	0.334	0.566	0.580	1.424
4.0	3.013	0.0378	0.360	0.563	0.634	1.417
5	3.386	0.0583	0.471	0.552	0.916	1.388
6	3.713	0.0825	0.535	0.545	1.183	1.368
7	3.962	0.110	0.560	0.540	1.398	1.354
8	4.131	0.140	0.567	0.536	1.543	1.344
9	4.237	0.173	0.567	0.533	1.626	1.337
10	4.302	0.207	0.565	0.531	1.669	1.331
12	4.379	0.277	0.558	0.528	1.694	1.322
14	4.430	0.344	0.553	0.526	1.690	1.317
16	4.469	0.404	0.548	0.525	1.679	1.313
18	4.500	0.454	0.544	0.524	1.667	1.312
20	4.520	0.492	0.541	0.523	1.656	1.309

A r 1s(2)2s(2)2p(6)3s(2)3p(6)

q ₁ -----	10.37	2.610	0.7869	2.635	0.6231	
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	2p(6)	3p(4)
0.2	0.0265	0.850(-4)	0.984(-3)	0.00693	0.00154	0.0169
0.4	0.108	0.340(-3)	0.00392	0.0284	0.00616	0.0688
0.6	0.244	0.765(-3)	0.00877	0.0646	0.0138	0.156
0.8	0.436	0.00136	0.0156	0.116	0.0245	0.279
1.0	0.683	0.00212	0.0244	0.181	0.0381	0.437
1.2	0.975	0.00306	0.0351	0.258	0.0550	0.624
1.4	1.299	0.00415	0.0476	0.340	0.0748	0.833
1.6	1.631	0.00542	0.0619	0.418	0.0975	1.048
1.8	1.944	0.00685	0.0780	0.484	0.123	1.252
2.0	2.216	0.00844	0.0956	0.533	0.152	1.428
2.2	2.435	0.0102	0.115	0.564	0.182	1.564
2.4	2.606	0.0121	0.135	0.583	0.216	1.659
2.6	2.733	0.0142	0.157	0.587	0.252	1.722
2.8	2.820	0.0164	0.180	0.586	0.290	1.748
3.0	2.888	0.0189	0.204	0.583	0.331	1.751
3.2	2.951	0.0214	0.229	0.580	0.373	1.747
3.4	3.014	0.0242	0.254	0.576	0.418	1.741
3.6	3.077	0.0271	0.279	0.573	0.464	1.733
3.8	3.142	0.0301	0.305	0.570	0.512	1.725
4.0	3.209	0.0333	0.330	0.567	0.561	1.717
5	3.551	0.0514	0.442	0.555	0.820	1.682
6	3.870	0.0730	0.517	0.547	1.077	1.656
7	4.128	0.0975	0.552	0.542	1.300	1.637
8	4.318	0.125	0.564	0.538	1.468	1.623
9	4.446	0.154	0.567	0.535	1.577	1.613
10	4.528	0.185	0.566	0.533	1.640	1.605
12	4.620	0.250	0.561	0.529	1.688	1.593
14	4.674	0.314	0.555	0.527	1.693	1.585
16	4.715	0.374	0.550	0.525	1.685	1.581
18	4.747	0.426	0.546	0.525	1.674	1.576
20	4.772	0.468	0.543	0.524	1.663	1.575

K 1s(2) 2s(2) 3s(2) 4s(1) 2p(6) 3p(6)

q1	10.75	2.813	0.8905	0.2185	2.868	0.7610	
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(1)	2p(6)	3p(6)
0.2	0.0570	0.796(-4)	0.866(3)	0.00572	0.0366	0.00133	0.0124
0.4	0.263	0.319(-3)	0.00345	0.0233	0.181	0.00531	0.0497
0.6	0.481	0.717(-3)	0.00772	0.0528	0.295	0.0119	0.113
0.8	0.644	0.00127	0.0137	0.0944	0.313	0.0211	0.201
1.0	0.814	0.00199	0.0215	0.148	0.297	0.0328	0.313
1.2	1.029	0.00286	0.0309	0.211	0.287	0.0474	0.450
1.4	1.278	0.00389	0.0419	0.282	0.281	0.0645	0.606
1.6	1.550	0.00507	0.0545	0.354	0.277	0.0841	0.776
1.8	1.830	0.00641	0.0687	0.422	0.274	0.106	0.953
2.0	2.102	0.00791	0.0843	0.480	0.272	0.131	1.127
2.2	2.352	0.00955	0.101	0.525	0.270	0.157	1.289
2.4	2.568	0.0113	0.120	0.556	0.267	0.186	1.429
2.6	2.754	0.0133	0.139	0.576	0.266	0.218	1.542
2.8	2.902	0.0154	0.160	0.583	0.265	0.251	1.628
3.0	3.022	0.0177	0.181	0.584	0.265	0.287	1.688
3.2	3.114	0.0201	0.203	0.582	0.264	0.324	1.720
3.4	3.189	0.0227	0.226	0.580	0.264	0.363	1.733
3.6	3.257	0.0254	0.250	0.578	0.264	0.404	1.737
3.8	3.321	0.0282	0.273	0.575	0.263	0.446	1.736
4.0	3.385	0.0312	0.297	0.572	0.263	0.490	1.733
5	3.705	0.0482	0.408	0.560	0.262	0.723	1.705
6	4.014	0.0685	0.491	0.552	0.262	0.963	1.678
7	4.279	0.0917	0.538	0.545	0.261	1.186	1.657
8	4.488	0.117	0.558	0.541	0.261	1.370	1.641
9	4.642	0.145	0.565	0.538	0.261	1.504	1.629
10	4.747	0.175	0.566	0.535	0.260	1.592	1.619
12	4.867	0.237	0.563	0.531	0.260	1.672	1.605
14	4.932	0.299	0.557	0.528	0.260	1.692	1.595
16	4.975	0.358	0.552	0.527	0.260	1.690	1.587
18	5.010	0.411	0.548	0.525	0.260	1.682	1.584
20	5.034	0.455	0.545	0.525	0.259	1.672	1.579

Ca 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)2p(6)3p(6)

ν	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)
0.2	0.0528	0.720(-4)	0.777(-3)	0.00479	0.0361	0.00118	0.00998
0.4	0.231	0.288(-3)	0.00310	0.0194	0.164	0.00471	0.0400
0.6	0.536	0.649(-3)	0.00693	0.0439	0.384	0.0106	0.0904
0.8	0.826	0.00115	0.0123	0.0783	0.554	0.0187	0.161
1.0	1.018	0.00180	0.0193	0.123	0.594	0.0292	0.251
1.2	1.191	0.00259	0.0277	0.176	0.583	0.0419	0.361
1.4	1.393	0.00352	0.0376	0.236	0.573	0.0571	0.487
1.6	1.620	0.00460	0.0489	0.300	0.564	0.0746	0.628
1.8	1.863	0.00581	0.0617	0.364	0.558	0.0942	0.779
2.0	2.109	0.00716	0.0757	0.424	0.552	0.116	0.934
2.2	2.352	0.00865	0.0910	0.476	0.548	0.140	1.088
2.4	2.579	0.0103	0.108	0.518	0.544	0.166	1.233
2.6	2.785	0.0120	0.125	0.548	0.542	0.194	1.364
2.8	2.964	0.0139	0.144	0.568	0.539	0.223	1.475
3.0	3.115	0.0160	0.163	0.578	0.537	0.255	1.566
3.2	3.242	0.0182	0.184	0.581	0.536	0.288	1.635
3.4	3.346	0.0205	0.205	0.581	0.534	0.323	1.682
3.6	3.431	0.0230	0.226	0.580	0.533	0.360	1.708
3.8	3.504	0.0256	0.248	0.578	0.533	0.398	1.721
4.0	3.570	0.0283	0.270	0.576	0.531	0.438	1.727
5	3.881	0.0438	0.378	0.565	0.528	0.650	1.717
6	4.177	0.0622	0.466	0.556	0.525	0.876	1.693
7	4.444	0.0834	0.522	0.549	0.524	1.093	1.672
8	4.663	0.107	0.550	0.544	0.524	1.283	1.655
9	4.831	0.133	0.562	0.540	0.523	1.433	1.641
10	4.954	0.160	0.565	0.537	0.522	1.539	1.630
12	5.101	0.218	0.564	0.533	0.521	1.650	1.614
14	5.177	0.278	0.559	0.530	0.521	1.686	1.603
16	5.225	0.335	0.555	0.528	0.520	1.692	1.595
18	5.259	0.388	0.550	0.527	0.520	1.687	1.588
20	5.288	0.433	0.547	0.525	0.520	1.678	1.584

Sc 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)2p(6)3p(6)3d(1)

	q1	11.96	3.181	1.071	0.2859	3.273	0.9436	0.6286
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	3d(1)
0.2	0.0550	0.654(-4)	0.701(3)	0.00428	0.0332	0.00105	0.00870	0.00709
0.4	0.237	0.262(-3)	0.00280	0.0173	0.149	0.00421	0.0347	0.0294
0.6	0.555	0.580(-3)	0.00626	0.0390	0.352	0.00946	0.0786	0.0686
0.8	0.896	0.00105	0.0111	0.0696	0.534	0.0168	0.140	0.124
1.0	1.155	0.00164	0.0174	0.109	0.598	0.0261	0.218	0.187
1.2	1.372	0.00235	0.0250	0.156	0.595	0.0374	0.313	0.243
1.4	1.582	0.00320	0.0339	0.210	0.582	0.0511	0.424	0.278
1.6	1.796	0.00418	0.0442	0.269	0.572	0.0666	0.547	0.293
1.8	2.021	0.00528	0.0557	0.329	0.564	0.0842	0.682	0.301
2.0	2.244	0.00651	0.0684	0.388	0.558	0.104	0.823	0.297
2.2	2.469	0.00786	0.0823	0.442	0.553	0.125	0.966	0.294
2.4	2.688	0.00934	0.0973	0.487	0.549	0.148	1.107	0.290
2.6	2.892	0.0110	0.113	0.524	0.545	0.173	1.239	0.287
2.8	3.079	0.0127	0.130	0.550	0.542	0.200	1.359	0.285
3.0	3.244	0.0145	0.148	0.568	0.540	0.229	1.462	0.282
3.2	3.385	0.0165	0.167	0.576	0.538	0.259	1.548	0.280
3.4	3.505	0.0186	0.186	0.579	0.536	0.290	1.615	0.279
3.6	3.605	0.0209	0.206	0.579	0.535	0.323	1.664	0.277
3.8	3.689	0.0232	0.227	0.579	0.534	0.358	1.693	0.276
4.0	3.761	0.0257	0.247	0.577	0.532	0.394	1.710	0.275
5	4.065	0.0398	0.350	0.567	0.528	0.588	1.721	0.270
6	4.350	0.0567	0.440	0.559	0.526	0.798	1.702	0.268
7	4.610	0.0761	0.504	0.552	0.525	1.007	1.681	0.266
8	4.835	0.0978	0.539	0.546	0.524	1.199	1.664	0.265
9	5.014	0.121	0.556	0.542	0.523	1.359	1.649	0.264
10	5.152	0.147	0.563	0.539	0.522	1.480	1.638	0.263
12	5.326	0.201	0.565	0.535	0.522	1.621	1.620	0.262
14	5.416	0.258	0.561	0.531	0.521	1.676	1.608	0.262
16	5.470	0.313	0.557	0.529	0.520	1.691	1.599	0.261
18	5.509	0.366	0.552	0.528	0.520	1.690	1.592	0.261
20	5.537	0.412	0.549	0.526	0.520	1.683	1.586	0.261

Ti 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)2p(6)3p(6)3d(2)

qi	-----	12.54	3.364	1.140	0.2973	3.473	1.010	0.7176
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	3d(2)
0.2	0.0526	0.599(-4)	0.636(3)	0.00387	0.0312	0.949(-3)	0.00782	0.00803
0.4	0.225	0.240(-3)	0.00234	0.0156	0.139	0.00379	0.0311	0.0328
0.6	0.526	0.540(-3)	0.00569	0.0352	0.330	0.00852	0.0706	0.0750
0.8	0.866	0.959(-3)	0.0101	0.0628	0.516	0.0151	0.126	0.135
1.0	1.137	0.00150	0.0157	0.0981	0.592	0.0235	0.196	0.211
1.2	1.407	0.00216	0.0227	0.141	0.629	0.0337	0.281	0.298
1.4	1.670	0.00293	0.0308	0.190	0.634	0.0459	0.380	0.386
1.6	1.917	0.00383	0.0401	0.244	0.613	0.0600	0.492	0.465
1.8	2.169	0.00484	0.0506	0.300	0.599	0.0758	0.614	0.524
2.0	2.406	0.00597	0.0622	0.357	0.582	0.0934	0.744	0.561
2.2	2.639	0.00721	0.0748	0.410	0.573	0.113	0.878	0.583
2.4	2.860	0.00857	0.0885	0.458	0.569	0.134	1.012	0.590
2.6	3.057	0.0100	0.103	0.498	0.559	0.156	1.142	0.588
2.8	3.243	0.0116	0.119	0.530	0.555	0.181	1.264	0.584
3.0	3.417	0.0133	0.135	0.553	0.555	0.206	1.373	0.580
3.2	3.564	0.0151	0.152	0.568	0.550	0.234	1.468	0.576
3.4	3.688	0.0171	0.170	0.575	0.544	0.262	1.547	0.573
3.6	3.798	0.0191	0.189	0.578	0.542	0.292	1.610	0.569
3.8	3.889	0.0213	0.208	0.578	0.537	0.324	1.655	0.566
4.0	3.965	0.0236	0.227	0.578	0.533	0.356	1.684	0.563
5	4.268	0.0366	0.325	0.570	0.529	0.535	1.720	0.552
6	4.537	0.0521	0.415	0.561	0.527	0.731	1.707	0.544
7	4.791	0.0700	0.484	0.554	0.525	0.930	1.688	0.539
8	5.014	0.0901	0.527	0.548	0.524	1.119	1.671	0.536
9	5.201	0.112	0.550	0.544	0.523	1.284	1.656	0.533
10	5.350	0.136	0.560	0.541	0.522	1.417	1.644	0.531
12	5.548	0.187	0.565	0.536	0.522	1.586	1.625	0.528
14	5.655	0.240	0.563	0.532	0.521	1.661	1.612	0.526
16	5.717	0.294	0.558	0.530	0.521	1.687	1.603	0.525
18	5.759	0.345	0.554	0.528	0.520	1.691	1.596	0.524
20	5.789	0.392	0.550	0.527	0.520	1.687	1.590	0.523

V 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)2p(6)3p(6)3d(3)

q1	-----	13.15	3.546	1.207	0.3078	3.673	1.075	0.7885
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	3d(3)
0.2	0.0501	0.549(-4)	0.580(3)	0.00354	0.0296	0.859(-3)	0.00706	0.00840
0.4	0.213	0.220(-3)	0.00232	0.0142	0.131	0.00343	0.0280	0.0341
0.6	0.499	0.494(-3)	0.00519	0.0321	0.312	0.00771	0.0636	0.0774
0.8	0.832	0.879(-3)	0.00919	0.0572	0.499	0.0137	0.113	0.139
1.0	1.106	0.00137	0.0144	0.0893	0.586	0.0213	0.177	0.217
1.2	1.342	0.00198	0.0207	0.128	0.598	0.0306	0.253	0.310
1.4	1.588	0.00269	0.0281	0.173	0.586	0.0416	0.343	0.414
1.6	1.859	0.00351	0.0366	0.223	0.577	0.0543	0.444	0.521
1.8	2.140	0.00443	0.0462	0.275	0.568	0.0687	0.556	0.623
2.0	2.423	0.00547	0.0568	0.329	0.561	0.0846	0.675	0.711
2.2	2.694	0.00661	0.0684	0.382	0.556	0.102	0.799	0.780
2.4	2.945	0.00786	0.0809	0.430	0.551	0.121	0.926	0.828
2.6	3.176	0.00921	0.0944	0.473	0.547	0.142	1.105	0.860
2.8	3.379	0.0107	0.109	0.508	0.544	0.164	1.171	0.873
3.0	3.560	0.0122	0.124	0.536	0.543	0.187	1.283	0.875
3.2	3.720	0.0139	0.140	0.556	0.541	0.212	1.384	0.874
3.4	3.858	0.0157	0.156	0.568	0.538	0.238	1.472	0.871
3.6	3.979	0.0175	0.173	0.574	0.537	0.266	1.545	0.867
3.8	4.084	0.0195	0.191	0.576	0.536	0.294	1.604	0.863
4.0	4.173	0.0216	0.209	0.577	0.535	0.324	1.657	0.859
5	4.481	0.0336	0.302	0.571	0.529	0.489	1.716	0.841
6	4.738	0.0479	0.391	0.563	0.527	0.671	1.711	0.828
7	4.982	0.0644	0.463	0.556	0.525	0.860	1.694	0.819
8	5.204	0.0829	0.512	0.550	0.525	1.104	1.677	0.812
9	5.393	0.103	0.541	0.546	0.523	1.210	1.662	0.807
10	5.549	0.125	0.556	0.542	0.523	1.351	1.650	0.803
12	5.768	0.173	0.565	0.537	0.522	1.544	1.631	0.797
14	5.891	0.224	0.564	0.534	0.521	1.640	1.617	0.793
16	5.962	0.275	0.560	0.531	0.521	1.679	1.607	0.790
18	6.009	0.325	0.556	0.529	0.521	1.691	1.599	0.788
20	6.042	0.372	0.552	0.528	0.520	1.690	1.593	0.787

Cr 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)2p(6)3p(6)3d(4)

q1	-----	13.77	3.728	1.273	0.3175	3.872	1.139	0.8529
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	3d(4)
0.2	0.0478	0.504(-4)	0.532(3)	0.00325	0.0282	0.782(-3)	0.00642	0.00851
0.4	0.202	0.202(-3)	0.00212	0.0130	0.124	0.00313	0.0255	0.0343
0.6	0.473	0.454(-3)	0.00476	0.0294	0.296	0.00702	0.0578	0.0777
0.8	0.798	0.807(-3)	0.00843	0.0523	0.483	0.0125	0.103	0.139
1.0	1.070	0.00126	0.0131	0.0817	0.577	0.0194	0.160	0.216
1.2	1.313	0.00181	0.0190	0.117	0.607	0.0279	0.230	0.310
1.4	1.549	0.00247	0.0258	0.158	0.595	0.0378	0.312	0.418
1.6	1.812	0.00322	0.0336	0.204	0.583	0.0494	0.404	0.535
1.8	2.097	0.00408	0.0424	0.254	0.574	0.0625	0.506	0.655
2.0	2.393	0.00502	0.0521	0.305	0.566	0.0771	0.615	0.773
2.2	2.688	0.00607	0.0628	0.355	0.560	0.0931	0.731	0.880
2.4	2.972	0.00722	0.0743	0.404	0.555	0.111	0.850	0.972
2.6	3.237	0.00846	0.0867	0.447	0.551	0.129	0.970	1.044
2.8	3.476	0.00980	0.0999	0.485	0.547	0.149	1.087	1.098
3.0	3.690	0.0112	0.114	0.516	0.545	0.171	1.198	1.135
3.2	3.871	0.0128	0.129	0.540	0.542	0.194	1.302	1.152
3.4	4.026	0.0144	0.144	0.558	0.540	0.218	1.395	1.158
3.6	4.159	0.0161	0.160	0.568	0.538	0.243	1.476	1.159
3.8	4.274	0.0180	0.176	0.573	0.537	0.269	1.544	1.157
4.0	4.373	0.0199	0.193	0.575	0.535	0.296	1.599	1.155
5	4.705	0.0309	0.281	0.573	0.530	0.448	1.707	1.135
6	4.953	0.0441	0.368	0.565	0.528	0.618	1.713	1.117
7	5.184	0.0593	0.442	0.558	0.525	0.797	1.700	1.103
8	5.401	0.0765	0.496	0.552	0.525	0.974	1.683	1.093
9	5.590	0.0954	0.530	0.548	0.524	1.140	1.669	1.085
10	5.751	0.116	0.549	0.544	0.523	1.286	1.656	1.078
12	5.987	0.160	0.563	0.538	0.522	1.498	1.636	1.069
14	6.126	0.208	0.564	0.535	0.521	1.614	1.621	1.063
16	6.207	0.258	0.561	0.532	0.521	1.667	1.610	1.058
18	6.258	0.306	0.558	0.530	0.520	1.687	1.602	1.055
20	6.294	0.352	0.554	0.528	0.520	1.691	1.596	1.052

M n 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)2p(6)3p(6)3d(5)

q1	-----	14.38	3.908	1.339	0.3263	4.070	1.201	0.9177
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	3d(5)
0.2	0.0456	0.465(-4)	0.490(-3)	0.00299	0.0271	0.715(-3)	0.00588	0.00840
0.4	0.192	0.186(-3)	0.00196	0.0120	0.118	0.00286	0.0233	0.0337
0.6	0.450	0.419(-3)	0.00439	0.0271	0.283	0.00643	0.0529	0.0762
0.8	0.766	0.745(-3)	0.00777	0.0481	0.468	0.0114	0.0941	0.136
1.0	1.037	0.00116	0.0121	0.0751	0.572	0.0178	0.147	0.212
1.2	1.276	0.00168	0.0175	0.108	0.609	0.0255	0.211	0.304
1.4	1.499	0.00228	0.0237	0.146	0.597	0.0346	0.285	0.410
1.6	1.751	0.00297	0.0309	0.188	0.585	0.0452	0.370	0.529
1.8	2.029	0.00376	0.0390	0.234	0.575	0.0572	0.464	0.656
2.0	2.325	0.00464	0.0480	0.282	0.568	0.0706	0.565	0.786
2.2	2.629	0.00561	0.0579	0.331	0.561	0.0852	0.673	0.915
2.4	2.932	0.00667	0.0685	0.378	0.556	0.101	0.784	1.036
2.6	3.224	0.00781	0.0800	0.423	0.552	0.118	0.898	1.145
2.8	3.496	0.00905	0.0922	0.462	0.548	0.137	1.011	1.237
3.0	3.745	0.0104	0.105	0.496	0.545	0.157	1.121	1.311
3.2	3.966	0.0118	0.119	0.523	0.543	0.178	1.224	1.368
3.4	4.157	0.0133	0.133	0.544	0.541	0.200	1.320	1.405
3.6	4.315	0.0149	0.148	0.559	0.539	0.223	1.407	1.426
3.8	4.448	0.0166	0.163	0.567	0.537	0.247	1.482	1.436
4.0	4.562	0.0184	0.179	0.572	0.536	0.272	1.545	1.440
5	4.931	0.0285	0.262	0.573	0.530	0.413	1.694	1.430
6	5.175	0.0407	0.346	0.567	0.528	0.571	1.713	1.410
7	5.398	0.0549	0.421	0.560	0.526	0.740	1.703	1.393
8	5.606	0.0708	0.479	0.554	0.525	0.911	1.689	1.378
9	5.794	0.0884	0.518	0.549	0.524	1.074	1.674	1.367
10	5.958	0.108	0.542	0.545	0.523	1.221	1.661	1.358
12	6.205	0.149	0.561	0.540	0.522	1.448	1.641	1.344
14	6.360	0.195	0.565	0.536	0.521	1.584	1.625	1.335
16	6.452	0.242	0.562	0.533	0.521	1.652	1.614	1.328
18	6.509	0.289	0.559	0.530	0.521	1.681	1.606	1.323
20	6.548	0.334	0.555	0.529	0.520	1.690	1.599	1.320

Fe 1s(2) 2s(2) 3s(2) 4s(2) 2p(6) 3p(6) 3d(6)

q1	-----	14.97	4.089	1.406	0.3365	4.269	1.266	0.9630
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	3d(6)
0.2	0.0436	0.432(-4)	0.452(-3)	0.00276	0.0259	0.657(-3)	0.00539	0.00846
0.4	0.183	0.173(-3)	0.00181	0.0110	0.112	0.00263	0.0214	0.0337
0.6	0.429	0.389(-3)	0.00406	0.0250	0.269	0.00590	0.0484	0.0764
0.8	0.736	0.691(-3)	0.00718	0.0444	0.451	0.0105	0.0861	0.136
1.0	1.008	0.00108	0.0112	0.0693	0.563	0.0163	0.134	0.212
1.2	1.240	0.00155	0.0161	0.0994	0.602	0.0235	0.193	0.304
1.4	1.460	0.00212	0.0219	0.134	0.597	0.0318	0.261	0.412
1.6	1.703	0.00276	0.0286	0.174	0.586	0.0415	0.339	0.532
1.8	1.973	0.00349	0.0361	0.217	0.576	0.0525	0.425	0.663
2.0	2.264	0.00431	0.0444	0.262	0.568	0.0648	0.519	0.801
2.2	2.568	0.00521	0.0535	0.309	0.562	0.0783	0.619	0.942
2.4	2.878	0.00619	0.0634	0.354	0.557	0.0930	0.723	1.081
2.6	3.185	0.00726	0.0740	0.398	0.553	0.109	0.830	1.213
2.8	3.479	0.00841	0.0854	0.439	0.549	0.126	0.938	1.334
3.0	3.755	0.00964	0.0974	0.474	0.546	0.144	1.045	1.439
3.2	4.008	0.0110	0.110	0.504	0.544	0.163	1.147	1.528
3.4	4.233	0.0124	0.123	0.529	0.542	0.184	1.244	1.598
3.6	4.428	0.0138	0.137	0.547	0.540	0.205	1.334	1.651
3.8	4.589	0.0154	0.152	0.559	0.538	0.227	1.414	1.684
4.0	4.726	0.0170	0.166	0.567	0.537	0.251	1.484	1.704
5	5.152	0.0265	0.245	0.574	0.530	0.381	1.674	1.721
6	5.423	0.0379	0.326	0.568	0.528	0.529	1.710	1.703
7	5.617	0.0511	0.401	0.562	0.526	0.689	1.706	1.683
8	5.816	0.0660	0.462	0.556	0.525	0.852	1.694	1.666
9	5.946	0.0824	0.505	0.551	0.524	1.011	1.680	1.651
10	6.023	0.100	0.533	0.547	0.523	1.158	1.667	1.639
12	6.164	0.140	0.558	0.541	0.522	1.396	1.646	1.622
14	6.266	0.183	0.564	0.537	0.521	1.549	1.630	1.609
16	6.324	0.228	0.563	0.534	0.521	1.633	1.618	1.601
18	6.357	0.273	0.560	0.532	0.521	1.672	1.609	1.594
20	6.378	0.317	0.557	0.530	0.520	1.688	1.602	1.589

C o 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)2p(6)3p(6)3d(7)

q1	-----	15.58	4.269	1.472	0.3457	4.467	1.329	1.014
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	3d(7)
0.2	0.0418	0.401(-4)	0.419(-3)	0.00256	0.0248	0.605(-3)	0.00497	0.00834
0.4	0.175	0.160(-3)	0.00168	0.0102	0.107	0.00242	0.0198	0.0831
0.6	0.409	0.361(-3)	0.00376	0.0231	0.256	0.00544	0.0446	0.0751
0.8	0.707	0.642(-3)	0.00666	0.0411	0.436	0.00966	0.0794	0.134
1.0	0.977	0.00100	0.0104	0.0642	0.554	0.0151	0.124	0.208
1.2	1.199	0.00144	0.0149	0.0921	0.592	0.0216	0.178	0.299
1.4	1.420	0.00196	0.0203	0.125	0.598	0.0294	0.241	0.405
1.6	1.652	0.00256	0.0265	0.161	0.587	0.0382	0.313	0.524
1.8	1.911	0.00324	0.0335	0.201	0.577	0.0484	0.392	0.656
2.0	2.194	0.00400	0.0412	0.244	0.570	0.0597	0.479	0.796
2.2	2.493	0.00484	0.0497	0.288	0.563	0.0722	0.572	0.943
2.4	2.802	0.00575	0.0589	0.333	0.558	0.0858	0.670	1.091
2.6	3.115	0.00674	0.0687	0.376	0.554	0.100	0.771	1.238
2.8	3.423	0.00781	0.0793	0.416	0.550	0.116	0.874	1.379
3.0	3.719	0.00896	0.0905	0.453	0.547	0.133	0.977	1.509
3.2	3.996	0.0102	0.102	0.485	0.544	0.151	1.077	1.626
3.4	4.251	0.0115	0.115	0.512	0.542	0.170	1.174	1.728
3.6	4.479	0.0129	0.128	0.533	0.540	0.189	1.264	1.812
3.8	4.679	0.0143	0.141	0.549	0.538	0.210	1.347	1.879
4.0	4.848	0.0158	0.155	0.560	0.537	0.232	1.422	1.927
5	5.363	0.0246	0.230	0.573	0.531	0.353	1.649	2.003
6	5.624	0.0352	0.307	0.569	0.529	0.492	1.704	1.996
7	5.844	0.0475	0.381	0.563	0.526	0.642	1.708	1.976
8	6.034	0.0614	0.444	0.557	0.525	0.798	1.697	1.956
9	6.219	0.0768	0.491	0.552	0.524	0.952	1.684	1.939
10	6.382	0.0936	0.523	0.548	0.523	1.098	1.672	1.924
12	6.645	0.131	0.554	0.542	0.522	1.343	1.650	1.902
14	6.824	0.171	0.563	0.538	0.521	1.511	1.634	1.886
16	6.939	0.214	0.564	0.545	0.521	1.610	1.622	1.874
18	7.010	0.258	0.562	0.532	0.521	1.660	1.612	1.865
20	7.055	0.301	0.558	0.530	0.520	1.683	1.605	1.858

Ni 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)2p(6)3p(6)3d(8)

q1	-----	16.18	4.449	1.538	0.3546	4.664	1.392	1.065
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	3d(8)
0.2	0.0400	0.373(-4)	0.390(-3)	0.00239	0.0239	0.560(-3)	0.00460	0.00817
0.4	0.167	0.150(-3)	0.00156	0.00947	0.103	0.00224	0.0183	0.0324
0.6	0.390	0.337(-3)	0.00350	0.0215	0.246	0.00504	0.0412	0.0734
0.8	0.679	0.598(-3)	0.00620	0.0382	0.422	0.00894	0.0734	0.131
1.0	0.949	0.935(-3)	0.00965	0.0597	0.546	0.0139	0.115	0.204
1.2	1.167	0.00135	0.0139	0.0856	0.590	0.0200	0.164	0.292
1.4	1.378	0.00183	0.0189	0.116	0.596	0.0272	0.223	0.396
1.6	1.601	0.00239	0.0247	0.150	0.586	0.0354	0.289	0.513
1.8	1.850	0.00302	0.0312	0.188	0.577	0.0448	0.363	0.643
2.0	2.122	0.00373	0.0384	0.228	0.569	0.0553	0.444	0.784
2.2	2.413	0.00451	0.0462	0.270	0.563	0.0668	0.531	0.932
2.4	2.718	0.00536	0.0548	0.312	0.558	0.0794	0.623	1.085
2.6	3.030	0.00629	0.0640	0.354	0.554	0.0930	0.718	1.240
2.8	3.343	0.00728	0.0739	0.394	0.550	0.108	0.816	1.394
3.0	3.651	0.00835	0.0844	0.432	0.547	0.123	0.914	1.541
3.2	3.946	0.00949	0.0954	0.465	0.545	0.140	1.012	1.680
3.4	4.225	0.0107	0.107	0.494	0.542	0.157	1.107	1.807
3.6	4.481	0.0120	0.119	0.518	0.540	0.176	1.197	1.919
3.8	4.713	0.0133	0.132	0.537	0.539	0.195	1.282	2.015
4.0	4.917	0.0148	0.145	0.551	0.537	0.215	1.360	2.095
5	5.558	0.0230	0.215	0.572	0.533	0.328	1.618	2.268
6	5.860	0.0329	0.290	0.570	0.529	0.458	1.696	2.284
7	6.075	0.0444	0.362	0.565	0.527	0.600	1.707	2.269
8	6.265	0.0574	0.426	0.559	0.525	0.749	1.701	2.248
9	6.442	0.0719	0.476	0.554	0.525	0.898	1.689	2.229
10	6.602	0.0876	0.512	0.550	0.523	1.041	1.677	2.212
12	6.868	0.123	0.550	0.543	0.523	1.291	1.655	2.184
14	7.057	0.161	0.562	0.539	0.522	1.471	1.638	2.165
16	7.181	0.202	0.564	0.535	0.521	1.583	1.626	2.150
18	7.260	0.244	0.562	0.533	0.521	1.645	1.616	2.139
20	7.310	0.286	0.560	0.531	0.520	1.676	1.608	2.130

C u 1s(2)2s(2)3s(2)4s(1)2p(6)3p(6)3d(10)

ql	-----	16.77	4.625	1.584	0.3125	4.856	1.436	1.035
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(1)	2p(6)	3p(6)	3d(10)
0.2	0.0376	0.349(-4)	0.364(-3)	0.00227	0.0206	0.521(-3)	0.00437	0.00946
0.4	0.163	0.140(-3)	0.00146	0.00900	0.0952	0.00208	0.0174	0.0375
0.6	0.370	0.315(-3)	0.00327	0.0205	0.217	0.00468	0.0390	0.0850
0.8	0.559	0.560(-3)	0.00579	0.0364	0.288	0.00832	0.0696	0.151
1.0	0.721	0.874(-3)	0.00902	0.0568	0.297	0.0130	0.109	0.236
1.2	0.899	0.00126	0.0129	0.0815	0.290	0.0186	0.156	0.339
1.4	1.110	0.00171	0.0176	0.110	0.285	0.0253	0.211	0.459
1.6	1.350	0.00224	0.0230	0.143	0.280	0.0330	0.275	0.595
1.8	1.620	0.00283	0.0291	0.179	0.277	0.0416	0.345	0.746
2.0	1.915	0.00349	0.0358	0.217	0.275	0.0514	0.422	0.910
2.2	2.229	0.00422	0.0432	0.258	0.273	0.0622	0.505	1.084
2.4	2.557	0.00502	0.0512	0.299	0.271	0.0739	0.593	1.265
2.6	2.897	0.00588	0.0599	0.340	0.270	0.0866	0.684	1.450
2.8	3.238	0.00682	0.0691	0.380	0.269	0.100	0.779	1.635
3.0	3.576	0.00782	0.0789	0.417	0.268	0.115	0.874	1.816
3.2	3.904	0.00889	0.0893	0.451	0.267	0.130	0.969	1.988
3.4	4.215	0.0100	0.100	0.481	0.266	0.146	1.062	2.149
3.6	4.507	0.0112	0.112	0.507	0.266	0.164	1.152	2.295
3.8	4.772	0.0125	0.123	0.528	0.265	0.182	1.237	2.425
4.0	5.010	0.0138	0.136	0.544	0.265	0.201	1.316	2.535
5	5.771	0.0215	0.203	0.571	0.264	0.306	1.594	2.811
6	6.107	0.0308	0.274	0.571	0.262	0.428	1.688	2.853
7	6.324	0.0416	0.345	0.566	0.262	0.563	1.706	2.841
8	6.508	0.0538	0.409	0.560	0.261	0.705	1.702	2.818
9	6.678	0.0674	0.461	0.555	0.261	0.848	1.692	2.794
10	6.835	0.0823	0.500	0.551	0.261	0.989	1.680	2.773
12	7.098	0.115	0.544	0.544	0.260	1.239	1.658	2.738
14	7.294	0.152	0.560	0.539	0.260	1.429	1.641	2.712
16	7.427	0.191	0.564	0.536	0.260	1.555	1.628	2.693
18	7.512	0.231	0.563	0.533	0.260	1.628	1.618	2.678
20	7.567	0.272	0.561	0.531	0.260	1.667	1.610	2.667

Z n 1s(2) 2s(2) 3s(2) 4s(2) 2p(6) 3p(6) 3d(10)

q1	-----	17.37	4.804	1.668	0.3837	5.055	1.520	1.170
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	3d(10)
0.2	0.0358	0.327(-4)	0.341(-3)	0.00209	0.0212	0.484(-3)	0.00397	0.00771
0.4	0.148	0.131(-3)	0.00136	0.00828	0.0901	0.00194	0.0158	0.0307
0.6	0.345	0.295(-3)	0.00306	0.0188	0.214	0.00436	0.0354	0.0690
0.8	0.610	0.524(-3)	0.00542	0.0334	0.376	0.00774	0.0632	0.123
1.0	0.878	0.819(-3)	0.00844	0.0521	0.513	0.0121	0.0987	0.192
1.2	1.102	0.00118	0.0121	0.0748	0.580	0.0174	0.142	0.276
1.4	1.305	0.00160	0.0165	0.101	0.596	0.0236	0.192	0.373
1.6	1.509	0.00209	0.0215	0.131	0.589	0.0307	0.250	0.485
1.8	1.736	0.00265	0.0272	0.164	0.580	0.0387	0.314	0.609
2.0	1.986	0.00327	0.0335	0.200	0.573	0.0478	0.384	0.744
2.2	2.257	0.00395	0.0404	0.238	0.567	0.0578	0.460	0.890
2.4	2.544	0.00470	0.0480	0.277	0.561	0.0688	0.541	1.044
2.6	2.844	0.00551	0.0561	0.316	0.557	0.0806	0.626	1.204
2.8	3.153	0.00639	0.0647	0.355	0.553	0.0933	0.713	1.367
3.0	3.464	0.00733	0.0740	0.392	0.550	0.107	0.803	1.532
3.2	3.774	0.00833	0.0837	0.427	0.547	0.121	0.893	1.694
3.4	4.078	0.00939	0.0939	0.458	0.545	0.136	0.983	1.853
3.6	4.370	0.0105	0.105	0.486	0.543	0.153	1.071	2.004
3.8	4.647	0.0117	0.116	0.509	0.541	0.169	1.155	2.145
4.0	4.904	0.0130	0.128	0.528	0.539	0.187	1.235	2.274
5	5.840	0.0202	0.191	0.568	0.534	0.286	1.540	2.701
6	6.285	0.0289	0.259	0.571	0.530	0.401	1.668	2.827
7	6.537	0.0390	0.328	0.567	0.528	0.528	1.701	2.846
8	6.730	0.0505	0.392	0.562	0.526	0.663	1.704	2.834
9	6.902	0.0633	0.446	0.557	0.525	0.801	1.696	2.814
10	7.058	0.0773	0.488	0.553	0.524	0.937	1.685	2.794
12	7.324	0.109	0.537	0.546	0.523	1.187	1.664	2.758
14	7.526	0.143	0.557	0.541	0.522	1.385	1.647	2.730
16	7.667	0.181	0.563	0.537	0.522	1.522	1.633	2.709
18	7.760	0.219	0.564	0.534	0.521	1.607	1.622	2.692
20	7.821	0.259	0.562	0.532	0.521	1.655	1.614	2.679

Ga 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)2p(6)3p(6)4p(1)3d(10)

q1	-----	17.97	4.982	1.755	0.4430	5.292	1.594	0.3215	1.302
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(1)	3d(10)
0.2	0.0497	0.307(-4)	0.319(-3)	0.00192	0.0170	0.446(-3)	0.00366	0.0198	0.00645
0.4	0.213	0.123(-3)	0.00128	0.00761	0.0713	0.00178	0.0146	0.0908	0.0257
0.6	0.492	0.277(-3)	0.00287	0.0172	0.168	0.00401	0.0326	0.0209	0.0575
0.8	0.791	0.492(-3)	0.00508	0.0307	0.301	0.00712	0.0583	0.286	0.103
1.0	1.056	0.769(-3)	0.00792	0.0479	0.440	0.0111	0.0910	0.297	0.160
1.2	1.288	0.00111	0.0114	0.0687	0.538	0.0160	0.131	0.291	0.230
1.4	1.487	0.00151	0.0155	0.0930	0.582	0.0217	0.177	0.285	0.312
1.6	1.681	0.00197	0.0202	0.121	0.594	0.0283	0.230	0.281	0.405
1.8	1.879	0.00249	0.0255	0.151	0.587	0.0357	0.290	0.278	0.509
2.0	2.096	0.00307	0.0314	0.184	0.580	0.0440	0.355	0.275	0.624
2.2	2.334	0.00371	0.0379	0.220	0.574	0.0533	0.425	0.273	0.747
2.4	2.587	0.00441	0.0450	0.256	0.568	0.0633	0.501	0.271	0.879
2.6	2.856	0.00518	0.0526	0.294	0.563	0.0742	0.580	0.270	1.017
2.8	3.135	0.00600	0.0608	0.331	0.559	0.0859	0.662	0.269	1.161
3.0	3.419	0.00688	0.0694	0.367	0.555	0.0984	0.747	0.268	1.307
3.2	3.706	0.00782	0.0786	0.402	0.552	0.112	0.833	0.267	1.456
3.4	3.994	0.00882	0.0883	0.434	0.549	0.126	0.919	0.266	1.603
3.6	4.276	0.00988	0.0984	0.463	0.547	0.141	1.004	0.266	1.748
3.8	4.551	0.0110	0.109	0.489	0.545	0.156	1.087	0.266	1.888
4.0	4.792	0.0122	0.120	0.510	0.543	0.173	1.167	0.265	2.022
5	5.855	0.0189	0.180	0.563	0.536	0.264	1.488	0.264	2.540
6	6.420	0.0271	0.246	0.571	0.532	0.371	1.645	0.262	2.768
7	6.725	0.0367	0.312	0.568	0.530	0.490	1.694	0.262	2.832
8	6.935	0.0475	0.375	0.563	0.527	0.617	1.703	0.262	2.839
9	7.111	0.0596	0.430	0.559	0.526	0.749	1.699	0.261	2.828
10	7.269	0.0728	0.474	0.554	0.526	0.880	1.689	0.261	2.811
12	7.535	0.102	0.530	0.547	0.524	1.128	1.669	0.260	2.776
14	7.746	0.135	0.554	0.542	0.523	1.332	1.652	0.260	2.747
16	7.897	0.171	0.562	0.538	0.522	1.481	1.637	0.260	2.724
18	8.000	0.208	0.564	0.536	0.521	1.579	1.626	0.260	2.706
20	8.069	0.246	0.562	0.533	0.521	1.638	1.617	0.260	2.692

Ge 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)2p(6)3p(6)4p(2)3d(10)

q1	-----	18.60	5.163	1.843	0.5034	5.491	1.686	0.3851	1.427
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(2)	3d(10)
0.2	0.0288	0.300(-4)	0.177(-3)	0.00177	0.0140	0.417(-3)	0.00333	0.0211	0.00552
0.4	0.193	0.115(-3)	0.00120	0.00702	0.0580	0.00167	0.0133	0.0897	0.0220
0.6	0.450	0.260(-3)	0.00269	0.0159	0.135	0.00375	0.0296	0.0213	0.0491
0.8	0.800	0.461(-3)	0.00477	0.0283	0.244	0.00666	0.0530	0.375	0.0877
1.0	1.165	0.721(-3)	0.00743	0.0441	0.370	0.0104	0.0827	0.512	0.137
1.2	1.464	0.00104	0.0107	0.0633	0.481	0.0150	0.119	0.577	0.197
1.4	1.702	0.00141	0.0145	0.0857	0.552	0.0203	0.161	0.600	0.267
1.6	1.894	0.00184	0.0190	0.111	0.588	0.0265	0.210	0.591	0.347
1.8	2.071	0.00233	0.0240	0.140	0.590	0.0334	0.264	0.582	0.437
2.0	2.262	0.00288	0.0295	0.170	0.586	0.0411	0.323	0.574	0.535
2.2	2.469	0.00348	0.0356	0.203	0.580	0.0498	0.388	0.567	0.642
2.4	2.693	0.00414	0.0423	0.238	0.574	0.0592	0.457	0.562	0.757
2.6	2.930	0.00485	0.0494	0.273	0.569	0.0694	0.530	0.557	0.878
2.8	3.181	0.00563	0.0571	0.309	0.565	0.0804	0.606	0.554	1.004
3.0	3.439	0.00645	0.0653	0.344	0.561	0.0921	0.685	0.550	1.135
3.2	3.703	0.00734	0.0739	0.378	0.557	0.105	0.766	0.547	1.269
3.4	3.969	0.00827	0.0830	0.410	0.554	0.118	0.847	0.545	1.404
3.6	4.237	0.00927	0.0926	0.440	0.552	0.132	0.928	0.543	1.540
3.8	4.498	0.0103	0.103	0.467	0.549	0.146	1.009	0.541	1.673
4.0	4.755	0.0114	0.113	0.491	0.547	0.162	1.087	0.539	1.804
5	5.844	0.0178	0.170	0.557	0.539	0.248	1.420	0.533	2.360
6	6.529	0.0255	0.233	0.570	0.535	0.349	1.609	0.531	2.678
7	6.901	0.0344	0.297	0.569	0.532	0.461	1.681	0.528	2.799
8	7.139	0.0447	0.359	0.565	0.529	0.582	1.700	0.526	2.833
9	7.327	0.0560	0.415	0.560	0.527	0.709	1.700	0.526	2.834
10	7.487	0.0685	0.461	0.556	0.526	0.836	1.693	0.524	2.823
12	7.760	0.0964	0.521	0.549	0.525	1.079	1.675	0.523	2.792
14	7.974	0.123	0.550	0.544	0.523	1.287	1.657	0.522	2.763
16	8.132	0.162	0.561	0.540	0.523	1.445	1.643	0.521	2.738
18	8.244	0.197	0.564	0.537	0.522	1.553	1.631	0.521	2.719
20	8.319	0.234	0.563	0.534	0.522	1.621	1.622	0.521	2.703

A s 1s(2) 2s(2) 3s(2) 4s(2) 2p(6) 3p(6) 4p(3) 3d(10)

q1	-----	19.20	5.342	1.932	0.5583	5.691	1.784	0.4416	1.548
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(3)	3d(10)
0.2	0.0431	0.271(-4)	0.282(-3)	0.00164	0.0120	0.390(-3)	0.00303	0.0209	0.00481
0.4	0.176	0.108(-3)	0.00113	0.00655	0.0491	0.00156	0.0121	0.0864	0.0192
0.6	0.406	0.244(-3)	0.00254	0.0147	0.114	0.00352	0.0272	0.201	0.0432
0.8	0.732	0.434(-3)	0.00451	0.0262	0.206	0.00625	0.0483	0.364	0.0767
1.0	1.121	0.678(-3)	0.00703	0.0408	0.317	0.00976	0.0753	0.552	0.120
1.2	1.510	0.976(-3)	0.0101	0.0585	0.427	0.0140	0.108	0.719	0.172
1.4	1.833	0.00133	0.0137	0.0793	0.513	0.0191	0.147	0.827	0.233
1.6	2.086	0.00174	0.0179	0.103	0.564	0.0249	0.191	0.881	0.302
1.8	2.280	0.00220	0.0226	0.129	0.587	0.0315	0.240	0.886	0.381
2.0	2.459	0.00271	0.0279	0.158	0.591	0.0388	0.294	0.879	0.468
2.2	2.649	0.00328	0.0336	0.189	0.591	0.0469	0.354	0.870	0.562
2.4	2.847	0.00390	0.0399	0.221	0.585	0.0557	0.417	0.862	0.663
2.6	3.058	0.00457	0.0467	0.255	0.578	0.0653	0.484	0.854	0.771
2.8	3.284	0.00530	0.0539	0.289	0.575	0.0756	0.555	0.847	0.884
3.0	3.518	0.00608	0.0617	0.323	0.569	0.0866	0.629	0.841	1.001
3.2	3.759	0.00692	0.0699	0.356	0.564	0.0983	0.704	0.836	1.123
3.4	4.007	0.00781	0.0785	0.389	0.561	0.111	0.781	0.832	1.247
3.6	4.256	0.00874	0.0876	0.419	0.558	0.124	0.859	0.828	1.373
3.8	4.506	0.00974	0.0971	0.447	0.555	0.138	0.937	0.824	1.499
4.0	4.753	0.0108	0.107	0.473	0.552	0.152	1.013	0.821	1.624
5	5.875	0.0168	0.162	0.557	0.543	0.234	1.357	0.809	2.196
6	6.701	0.0241	0.222	0.590	0.538	0.330	1.591	0.802	2.604
7	7.216	0.0325	0.286	0.592	0.534	0.438	1.712	0.799	2.824
8	7.567	0.0422	0.349	0.583	0.531	0.555	1.770	0.794	2.943
9	7.738	0.0530	0.407	0.575	0.529	0.678	1.764	0.791	2.942
10	7.878	0.0649	0.457	0.569	0.527	0.804	1.748	0.790	2.918
12	8.127	0.0916	0.531	0.558	0.526	1.052	1.715	0.787	2.866
14	8.334	0.122	0.568	0.551	0.524	1.274	1.689	0.785	2.821
16	8.493	0.155	0.579	0.545	0.523	1.453	1.668	0.784	2.786
18	8.610	0.190	0.581	0.541	0.522	1.582	1.652	0.783	2.758
20	8.687	0.226	0.581	0.538	0.522	1.663	1.639	0.782	2.736

Se 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)2p(6)3p(6)4p(4)3d(10)

q1	-----	19.81	5.525	2.020	0.6112	5.893	1.870	0.4809	1.671
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(4)	3d(10)
0.2	0.0407	0.255(-4)	0.265(-3)	0.00152	0.0104	0.366(-3)	0.00279	0.0211	0.00419
0.4	0.165	0.102(-3)	0.00106	0.00608	0.0425	0.00147	0.0112	0.0862	0.0168
0.6	0.379	0.230(-3)	0.00239	0.0137	0.0978	0.00330	0.0251	0.199	0.0377
0.8	0.681	0.409(-3)	0.00424	0.0243	0.177	0.00586	0.0446	0.358	0.0669
1.0	1.059	0.639(-3)	0.00662	0.0378	0.274	0.00916	0.0695	0.556	0.104
1.2	1.472	0.921(-3)	0.00953	0.0543	0.379	0.0132	0.0998	0.766	0.150
1.4	1.865	0.00125	0.0129	0.0736	0.471	0.0179	0.135	0.950	0.203
1.6	2.191	0.00164	0.0169	0.0955	0.536	0.0234	0.176	1.078	0.264
1.8	2.454	0.00207	0.0213	0.120	0.574	0.0296	0.222	1.153	0.333
2.0	2.652	0.00256	0.0263	0.147	0.586	0.0365	0.272	1.173	0.409
2.2	2.887	0.00309	0.0317	0.176	0.605	0.0441	0.327	1.210	0.491
2.4	3.060	0.00368	0.0375	0.206	0.599	0.0523	0.386	1.196	0.580
2.6	3.245	0.00431	0.0440	0.238	0.592	0.0613	0.448	1.182	0.675
2.8	3.443	0.00500	0.0508	0.270	0.586	0.0710	0.514	1.170	0.776
3.0	3.651	0.00574	0.0581	0.303	0.580	0.0813	0.583	1.159	0.881
3.2	3.868	0.00653	0.0659	0.335	0.575	0.0924	0.654	1.149	0.980
3.4	4.092	0.00736	0.0741	0.367	0.571	0.104	0.727	1.140	1.102
3.6	4.321	0.00825	0.0826	0.398	0.567	0.116	0.801	1.133	1.217
3.8	4.553	0.00919	0.0916	0.426	0.563	0.129	0.875	1.126	1.333
4.0	4.784	0.0102	0.101	0.453	0.560	0.143	0.949	1.119	1.449
5	5.879	0.0158	0.153	0.546	0.549	0.220	1.292	1.097	2.008
6	6.744	0.0227	0.211	0.581	0.542	0.311	1.543	1.083	2.452
7	7.332	0.0307	0.272	0.593	0.537	0.413	1.683	1.073	2.730
8	7.739	0.0399	0.334	0.585	0.533	0.524	1.761	1.066	2.895
9	7.959	0.0501	0.391	0.578	0.530	0.642	1.766	1.061	2.941
10	8.107	0.0614	0.442	0.571	0.529	0.764	1.753	1.057	2.931
12	8.360	0.0867	0.520	0.560	0.527	1.005	1.722	1.054	2.885
14	8.568	0.115	0.562	0.552	0.525	1.227	1.695	1.050	2.841
16	8.731	0.147	0.577	0.547	0.524	1.411	1.674	1.047	2.804
18	8.853	0.180	0.581	0.542	0.523	1.549	1.657	1.046	2.775
20	8.946	0.215	0.590	0.539	0.522	1.640	1.644	1.044	2.751

B r 1s(2) 2s(2) 3s(2) 4s(2) 2p(6) 3p(6) 4p(5) 3d(10)

ql	-----	20.41	5.704	2.110	0.6626	6.366	1.962	0.5237	1.783
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(5)	3d(10)
0.2	0.0381	0.241(-4)	0.251(-3)	0.00141	0.00920	0.318(-3)	0.00257	0.0206	0.00377
0.4	0.154	0.967(-4)	0.00100	0.00565	0.0374	0.00127	0.0103	0.0835	0.0151
0.6	0.351	0.218(-3)	0.00226	0.0127	0.0856	0.00287	0.0231	0.191	0.0339
0.8	0.631	0.387(-3)	0.00401	0.0225	0.154	0.00509	0.0410	0.343	0.0602
1.0	0.985	0.605(-3)	0.00626	0.0351	0.241	0.00796	0.0640	0.537	0.0938
1.2	1.392	0.871(-3)	0.00900	0.0504	0.337	0.0115	0.0919	0.757	0.135
1.4	1.813	0.00119	0.0122	0.0684	0.429	0.0156	0.125	0.980	0.183
1.6	2.204	0.00155	0.0160	0.0888	0.503	0.0203	0.162	1.174	0.238
1.8	2.534	0.00196	0.0201	0.112	0.552	0.0257	0.204	1.319	0.300
2.0	2.805	0.00242	0.0248	0.137	0.579	0.0317	0.251	1.412	0.368
2.2	3.018	0.00292	0.0300	0.164	0.588	0.0383	0.301	1.452	0.443
2.4	3.253	0.00348	0.0356	0.192	0.601	0.0455	0.356	1.496	0.524
2.6	3.433	0.00408	0.0416	0.222	0.595	0.0533	0.414	1.493	0.610
2.8	3.614	0.00473	0.0481	0.253	0.589	0.0618	0.476	1.480	0.701
3.0	3.804	0.00543	0.0550	0.284	0.584	0.0708	0.540	1.468	0.797
3.2	4.002	0.00617	0.0623	0.316	0.579	0.0804	0.607	1.456	0.897
3.4	4.208	0.00696	0.0701	0.346	0.574	0.0906	0.675	1.444	1.000
3.6	4.420	0.00780	0.0782	0.376	0.570	0.101	0.745	1.434	1.106
3.8	4.635	0.00869	0.0867	0.405	0.567	0.113	0.816	1.425	1.215
4.0	4.852	0.00962	0.0956	0.432	0.564	0.125	0.887	1.417	1.324
5	5.907	0.0150	0.145	0.533	0.551	0.192	1.224	1.385	1.863
6	6.786	0.0215	0.201	0.575	0.544	0.272	1.487	1.365	2.321
7	7.423	0.0291	0.260	0.594	0.539	0.362	1.649	1.351	2.640
8	7.858	0.0378	0.320	0.587	0.535	0.462	1.744	1.341	2.831
9	8.130	0.0475	0.376	0.580	0.532	0.568	1.765	1.334	2.927
10	8.287	0.0582	0.428	0.573	0.530	0.679	1.757	1.328	2.934
12	8.536	0.0823	0.509	0.562	0.528	0.905	1.729	1.322	2.898
14	8.741	0.110	0.556	0.554	0.526	1.122	1.702	1.317	2.855
16	8.910	0.140	0.575	0.548	0.524	1.312	1.681	1.313	2.818
18	9.046	0.172	0.580	0.544	0.523	1.466	1.663	1.310	2.788
20	9.163	0.206	0.596	0.540	0.523	1.578	1.649	1.308	2.763

K r 1s(2) 2s(2) 3s(2) 4s(2) 2p(6) 3p(6) 4p(6) 3d(10)

q1	-----	21.00	5.888	2.199	0.7115	6.281	2.079	0.5679	1.898
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)
0.2	0.0357	0.229(-4)	0.237(-3)	0.00132	0.00823	0.326(-3)	0.00233	0.0198	0.00338
0.4	0.144	0.916(-4)	0.948(-3)	0.00527	0.0333	0.00131	0.00932	0.0799	0.0135
0.6	0.326	0.206(-3)	0.00213	0.0119	0.0762	0.00294	0.0210	0.182	0.0304
0.8	0.584	0.367(-3)	0.00379	0.0210	0.137	0.00522	0.0372	0.325	0.0540
1.0	0.913	0.573(-3)	0.00591	0.0328	0.214	0.00815	0.0580	0.509	0.0842
1.2	1.301	0.825(-3)	0.00850	0.0470	0.302	0.0117	0.0833	0.726	0.121
1.4	1.721	0.00112	0.0116	0.0638	0.391	0.0160	0.113	0.960	0.164
1.6	2.141	0.00147	0.0151	0.0829	0.469	0.0208	0.147	1.191	0.214
1.8	2.527	0.00186	0.0190	0.104	0.527	0.0263	0.185	1.393	0.269
2.0	2.860	0.00229	0.0235	0.128	0.565	0.0325	0.228	1.551	0.331
2.2	3.137	0.00277	0.0283	0.153	0.581	0.0392	0.274	1.661	0.398
2.4	3.377	0.00330	0.0336	0.180	0.598	0.0466	0.323	1.720	0.471
2.6	3.600	0.00387	0.0393	0.208	0.597	0.0547	0.377	1.771	0.549
2.8	3.794	0.00448	0.0455	0.237	0.592	0.0633	0.433	1.786	0.632
3.0	3.972	0.00515	0.0520	0.267	0.587	0.0725	0.492	1.778	0.719
3.2	4.156	0.00585	0.0590	0.297	0.582	0.0824	0.553	1.766	0.810
3.4	4.346	0.00660	0.0663	0.327	0.578	0.0928	0.617	1.754	0.905
3.6	4.542	0.00740	0.0740	0.357	0.574	0.104	0.682	1.742	1.002
3.8	4.742	0.00824	0.0821	0.385	0.570	0.115	0.748	1.731	1.103
4.0	4.946	0.00912	0.0906	0.412	0.567	0.128	0.815	1.721	1.204
5	5.960	0.0142	0.138	0.518	0.554	0.197	1.142	1.680	1.718
6	6.851	0.0204	0.191	0.568	0.546	0.278	1.415	1.652	2.180
7	7.543	0.0276	0.248	0.593	0.540	0.371	1.600	1.633	2.530
8	8.024	0.0358	0.306	0.589	0.537	0.472	1.710	1.620	2.755
9	8.366	0.0451	0.362	0.582	0.534	0.581	1.759	1.610	2.893
10	8.560	0.0552	0.414	0.575	0.531	0.694	1.760	1.602	2.929
12	8.826	0.0782	0.497	0.564	0.529	0.923	1.737	1.590	2.910
14	9.041	0.104	0.549	0.556	0.527	1.140	1.711	1.586	2.870
16	9.210	0.133	0.572	0.550	0.525	1.329	1.689	1.580	2.833
18	9.341	0.164	0.579	0.545	0.524	1.481	1.670	1.575	2.802
20	9.446	0.196	0.591	0.541	0.523	1.590	1.656	1.572	2.776

R.b 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(1)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)

q1	-----	21.44	6.084	2.294	0.7857	0.2084	6.483	2.175	0.6553	2.013
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(1)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)
0.2	0.0696	0.220(-4)	0.223(-3)	0.00123	0.00705	0.0398	0.308(-3)	0.00215	0.0158	0.00306
0.4	0.316	0.881(-4)	0.894(-3)	0.00491	0.0285	0.196	0.00123	0.00861	0.0635	0.0122
0.6	0.571	0.198(-3)	0.00201	0.0110	0.0648	0.300	0.00277	0.0194	0.144	0.0275
0.8	0.776	0.353(-3)	0.00357	0.0196	0.116	0.291	0.00493	0.0344	0.257	0.0488
1.0	1.041	0.551(-3)	0.00558	0.0305	0.182	0.283	0.00770	0.0536	0.402	0.0761
1.2	1.362	0.794(-3)	0.00802	0.0438	0.259	0.278	0.0111	0.0770	0.575	0.109
1.4	1.724	0.00108	0.0109	0.0594	0.340	0.274	0.0151	0.105	0.770	0.148
1.6	2.106	0.00141	0.0142	0.0772	0.419	0.272	0.0197	0.136	0.975	0.193
1.8	2.486	0.00179	0.0180	0.0971	0.485	0.270	0.0249	0.171	1.175	0.244
2.0	2.840	0.00220	0.0221	0.119	0.533	0.268	0.0307	0.211	1.355	0.299
2.2	3.156	0.00267	0.0267	0.143	0.565	0.267	0.0371	0.253	1.503	0.360
2.4	3.432	0.00317	0.0317	0.168	0.579	0.266	0.0440	0.300	1.614	0.426
2.6	3.680	0.00372	0.0371	0.194	0.596	0.265	0.0516	0.349	1.686	0.497
2.8	3.899	0.00431	0.0429	0.222	0.595	0.265	0.0598	0.401	1.736	0.573
3.0	4.111	0.00495	0.0491	0.251	0.591	0.264	0.0685	0.456	1.773	0.652
3.2	4.293	0.00563	0.0557	0.279	0.587	0.264	0.0778	0.514	1.775	0.736
3.4	4.476	0.00635	0.0626	0.308	0.583	0.263	0.0877	0.574	1.769	0.823
3.6	4.661	0.00712	0.0699	0.337	0.579	0.263	0.0981	0.635	1.760	0.912
3.8	4.850	0.00793	0.0776	0.365	0.575	0.263	0.109	0.698	1.750	1.005
4.0	5.042	0.00878	0.0856	0.392	0.572	0.263	0.121	0.761	1.741	1.099
5	6.014	0.0137	0.130	0.502	0.558	0.262	0.186	1.078	1.699	1.585
6	6.902	0.0196	0.181	0.561	0.549	0.261	0.263	1.355	1.669	2.043
7	7.625	0.0266	0.236	0.591	0.543	0.261	0.351	1.555	1.648	2.414
8	8.146	0.0345	0.292	0.590	0.539	0.260	0.448	1.679	1.632	2.671
9	8.530	0.0434	0.347	0.584	0.536	0.260	0.552	1.749	1.620	2.839
10	8.768	0.0532	0.399	0.577	0.533	0.260	0.660	1.760	1.611	2.914
12	9.055	0.0754	0.484	0.566	0.529	0.260	0.883	1.742	1.598	2.917
14	9.274	0.101	0.540	0.558	0.528	0.260	1.097	1.717	1.592	2.883
16	9.448	0.129	0.568	0.551	0.526	0.260	1.288	1.695	1.585	2.847
18	9.583	0.158	0.578	0.546	0.525	0.259	1.444	1.676	1.580	2.815
20	9.687	0.190	0.584	0.543	0.524	0.259	1.561	1.661	1.576	2.789

S r 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)

q1	-----	22.09	6.267	2.392	0.8639	0.2546	6.681	2.276	0.7329	2.127
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)
0.2	0.0653	0.208(-4)	0.212(-3)	0.00114	0.00607	0.0395	0.291(-3)	0.00199	0.0132	0.00278
0.4	0.285	0.833(-4)	0.848(-3)	0.00457	0.0245	0.182	0.00117	0.00796	0.0530	0.0111
0.6	0.652	0.188(-3)	0.00191	0.0103	0.0555	0.419	0.00262	0.0179	0.120	0.0250
0.8	0.987	0.334(-3)	0.00339	0.0182	0.0993	0.572	0.00466	0.0318	0.214	0.0443
1.0	1.243	0.521(-3)	0.00529	0.0284	0.156	0.593	0.00729	0.0496	0.334	0.0691
1.2	1.512	0.750(-3)	0.00761	0.0408	0.222	0.581	0.0105	0.0712	0.479	0.0993
1.4	1.822	0.00102	0.0103	0.0553	0.295	0.570	0.0143	0.0966	0.644	0.135
1.6	2.161	0.00133	0.0135	0.0719	0.369	0.562	0.0186	0.126	0.823	0.176
1.8	2.513	0.00169	0.0170	0.0905	0.438	0.555	0.0235	0.159	1.007	0.221
2.0	2.860	0.00208	0.0210	0.111	0.494	0.550	0.0290	0.195	1.185	0.272
2.2	3.186	0.00252	0.0254	0.133	0.536	0.546	0.0351	0.235	1.346	0.328
2.4	3.484	0.00300	0.0301	0.157	0.563	0.543	0.0417	0.277	1.481	0.388
2.6	3.751	0.00352	0.0352	0.182	0.579	0.540	0.0489	0.323	1.587	0.453
2.8	3.996	0.00408	0.0407	0.208	0.594	0.538	0.0566	0.372	1.661	0.522
3.0	4.214	0.00468	0.0466	0.235	0.593	0.536	0.0649	0.423	1.715	0.595
3.2	4.425	0.00532	0.0529	0.263	0.590	0.534	0.0737	0.477	1.757	0.672
3.4	4.610	0.00601	0.0595	0.290	0.587	0.533	0.0830	0.533	1.767	0.752
3.6	4.792	0.00673	0.0664	0.318	0.583	0.533	0.0929	0.591	1.766	0.835
3.8	4.972	0.00749	0.0737	0.345	0.580	0.531	0.103	0.650	1.761	0.920
4.0	5.154	0.00830	0.0813	0.372	0.576	0.530	0.114	0.710	1.754	1.008
5	6.084	0.0129	0.124	0.485	0.562	0.527	0.176	1.015	1.715	1.467
6	6.959	0.0186	0.173	0.551	0.553	0.525	0.250	1.292	1.684	1.914
7	7.700	0.0251	0.225	0.585	0.547	0.524	0.334	1.505	1.661	2.296
8	8.261	0.0327	0.280	0.591	0.541	0.523	0.426	1.644	1.643	2.580
9	8.679	0.0411	0.334	0.586	0.538	0.522	0.526	1.731	1.630	2.772
10	8.963	0.0504	0.385	0.579	0.535	0.522	0.630	1.756	1.620	2.885
12	9.280	0.0714	0.471	0.568	0.531	0.521	0.846	1.747	1.605	2.920
14	9.505	0.0955	0.531	0.560	0.529	0.521	1.056	1.723	1.595	2.894
16	9.685	0.122	0.563	0.553	0.527	0.520	1.247	1.701	1.591	2.859
18	9.823	0.151	0.576	0.548	0.526	0.520	1.408	1.683	1.585	2.828
20	9.930	0.181	0.582	0.544	0.525	0.520	1.532	1.667	1.580	2.801

Y 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)4d(1)

q1	-----	22.77	6.446	2.478	0.9202	0.2692	6.878	2.375	0.7913	2.198	0.4980
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)	4d(1)
0.2	0.0696	0.196(-4)	0.201(-3)	0.00108	0.00550	0.0364	0.276(-3)	0.00185	0.0117	0.00262	0.0101
0.4	0.301	0.787(-4)	0.806(-3)	0.00430	0.0221	0.165	0.00111	0.00739	0.0468	0.0105	0.0430
0.6	0.699	0.177(-3)	0.00181	0.00967	0.0500	0.387	0.00249	0.0166	0.106	0.0236	0.102
0.8	1.111	0.315(-3)	0.00322	0.0172	0.0895	0.557	0.00442	0.0295	0.188	0.0419	0.180
1.0	1.428	0.492(-3)	0.00503	0.0268	0.140	0.594	0.00691	0.0460	0.294	0.0653	0.250
1.2	1.708	0.709(-3)	0.00723	0.0384	0.200	0.583	0.00994	0.0661	0.422	0.0938	0.286
1.4	2.002	0.965(-3)	0.00983	0.0521	0.268	0.572	0.0135	0.0898	0.569	0.127	0.300
1.6	2.310	0.00126	0.0128	0.0677	0.338	0.564	0.0177	0.117	0.730	0.166	0.296
1.8	2.636	0.00159	0.0162	0.0852	0.405	0.557	0.0223	0.147	0.900	0.209	0.291
2.0	2.966	0.00197	0.0200	0.105	0.465	0.552	0.0275	0.181	1.070	0.257	0.288
2.2	3.288	0.00238	0.0241	0.126	0.512	0.548	0.0333	0.218	1.231	0.310	0.284
2.4	3.591	0.00283	0.0286	0.148	0.547	0.544	0.0396	0.258	1.374	0.367	0.282
2.6	3.867	0.00332	0.0335	0.172	0.568	0.541	0.0464	0.301	1.495	0.428	0.279
2.8	4.124	0.00385	0.0388	0.197	0.585	0.539	0.0537	0.346	1.590	0.494	0.277
3.0	4.354	0.00442	0.0444	0.222	0.593	0.537	0.0615	0.395	1.658	0.563	0.276
3.2	4.568	0.00503	0.0503	0.249	0.592	0.535	0.0699	0.445	1.712	0.636	0.274
3.4	4.771	0.00567	0.0566	0.276	0.589	0.534	0.0788	0.498	1.750	0.712	0.273
3.6	4.954	0.00636	0.0632	0.302	0.586	0.533	0.0882	0.552	1.761	0.791	0.272
3.8	5.133	0.00708	0.0702	0.329	0.582	0.533	0.0980	0.608	1.762	0.873	0.271
4.0	5.311	0.00784	0.0774	0.355	0.579	0.531	0.108	0.665	1.760	0.957	0.270
5	6.218	0.0122	0.118	0.469	0.565	0.528	0.167	0.958	1.726	1.398	0.267
6	7.072	0.0175	0.165	0.542	0.555	0.525	0.237	1.233	1.695	1.837	0.266
7	7.818	0.0238	0.216	0.578	0.548	0.524	0.317	1.454	1.670	2.223	0.264
8	8.405	0.0309	0.269	0.591	0.543	0.523	0.406	1.607	1.652	2.520	0.263
9	8.844	0.0389	0.322	0.587	0.539	0.523	0.501	1.707	1.638	2.727	0.263
10	9.159	0.0477	0.372	0.581	0.537	0.522	0.602	1.750	1.626	2.860	0.262
12	9.502	0.0676	0.459	0.570	0.532	0.521	0.811	1.750	1.610	2.919	0.262
14	9.731	0.0905	0.522	0.561	0.530	0.521	1.018	1.729	1.600	2.899	0.261
16	9.915	0.116	0.558	0.554	0.528	0.521	1.208	1.707	1.595	2.867	0.261
18	10.06	0.143	0.574	0.549	0.526	0.520	1.371	1.688	1.588	2.836	0.261
20	10.17	0.172	0.580	0.545	0.525	0.520	1.501	1.672	1.583	2.808	0.260

Zr 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)4d(2)

q1	-----	23.32	6.633	2.570	0.9719	0.2826	7.079	2.473	0.8435	2.326	0.5400
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)	4d(2)
0.2	0.0673	0.188(-4)	0.192(-3)	0.00101	0.00499	0.0337	0.262(-3)	0.00172	0.0105	0.00238	0.0126
0.4	0.288	0.754(-4)	0.765(-3)	0.00403	0.0202	0.151	0.00105	0.00688	0.0420	0.00949	0.0518
0.6	0.669	0.170(-3)	0.00172	0.00900	0.0458	0.358	0.00236	0.0154	0.0950	0.0213	0.120
0.8	1.094	0.302(-3)	0.00306	0.0161	0.0817	0.538	0.00420	0.0273	0.169	0.0377	0.217
1.0	1.460	0.472(-3)	0.00477	0.0251	0.128	0.596	0.00656	0.0426	0.264	0.0586	0.333
1.2	1.798	0.679(-3)	0.00685	0.0361	0.183	0.591	0.00943	0.0614	0.379	0.0847	0.445
1.4	2.135	0.924(-3)	0.00929	0.0489	0.245	0.580	0.0128	0.0835	0.512	0.115	0.527
1.6	2.466	0.00121	0.0121	0.0636	0.312	0.570	0.0167	0.109	0.659	0.150	0.572
1.8	2.790	0.00153	0.0153	0.0800	0.377	0.562	0.0211	0.137	0.816	0.190	0.589
2.0	3.113	0.00188	0.0189	0.0982	0.437	0.556	0.0260	0.169	0.976	0.233	0.596
2.2	3.421	0.00228	0.0229	0.118	0.488	0.551	0.0315	0.203	1.133	0.281	0.590
2.4	3.716	0.00271	0.0271	0.139	0.528	0.547	0.0374	0.240	1.279	0.333	0.584
2.6	3.993	0.00318	0.0318	0.161	0.555	0.544	0.0438	0.280	1.407	0.388	0.578
2.8	4.248	0.00369	0.0368	0.185	0.574	0.542	0.0508	0.323	1.514	0.448	0.573
3.0	4.478	0.00423	0.0421	0.209	0.580	0.539	0.0582	0.368	1.598	0.511	0.568
3.2	4.689	0.00481	0.0478	0.234	0.582	0.537	0.0662	0.415	1.661	0.577	0.564
3.4	4.880	0.00543	0.0537	0.260	0.581	0.536	0.0746	0.464	1.699	0.646	0.560
3.6	5.059	0.00608	0.0600	0.286	0.580	0.535	0.0835	0.515	1.719	0.718	0.557
3.8	5.231	0.00677	0.0666	0.311	0.577	0.534	0.0929	0.567	1.727	0.793	0.554
4.0	5.401	0.00750	0.0735	0.337	0.575	0.532	0.103	0.621	1.730	0.870	0.552
5	6.388	0.0117	0.112	0.453	0.568	0.528	0.159	0.905	1.816	1.286	0.549
6	7.202	0.0168	0.157	0.531	0.558	0.526	0.226	1.176	1.762	1.708	0.542
7	7.927	0.0227	0.206	0.571	0.551	0.524	0.302	1.403	1.721	2.094	0.533
8	8.532	0.0295	0.257	0.590	0.545	0.524	0.386	1.568	1.691	2.409	0.530
9	8.994	0.0372	0.309	0.588	0.541	0.523	0.478	1.679	1.670	2.641	0.529
10	9.348	0.0456	0.359	0.583	0.538	0.522	0.574	1.739	1.654	2.802	0.527
12	9.734	0.0648	0.447	0.572	0.533	0.521	0.777	1.752	1.630	2.912	0.525
14	9.970	0.0867	0.512	0.563	0.532	0.521	0.979	1.734	1.614	2.906	0.524
16	10.15	0.111	0.552	0.556	0.529	0.520	1.167	1.713	1.599	2.878	0.524
18	10.29	0.137	0.570	0.551	0.527	0.520	1.332	1.694	1.591	2.848	0.522
20	10.41	0.165	0.576	0.546	0.525	0.520	1.466	1.678	1.585	2.821	0.522

Nb 1s(2)2s(2)3s(2)4S(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)4d(3)

q1	-----	23.96	6.813	2.661	1.022	0.2934	7.318	2.572	0.8935	2.440	0.5890
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)	4d(3)
0.2	0.0647	0.178(-4)	0.182(-3)	0.953(-3)	0.00465	0.0319	0.247(-3)	0.00161	0.00960	0.00218	0.0133
0.4	0.274	0.715(-4)	0.729(-3)	0.00381	0.0187	0.142	0.987(-3)	0.00644	0.0384	0.00873	0.0545
0.6	0.638	0.161(-3)	0.00164	0.00856	0.0422	0.338	0.00222	0.0145	0.0866	0.0196	0.125
0.8	1.059	0.286(-3)	0.00292	0.0152	0.0753	0.522	0.00395	0.0257	0.154	0.0349	0.225
1.0	1.429	0.447(-3)	0.00455	0.0237	0.118	0.591	0.00617	0.0401	0.240	0.0544	0.351
1.2	1.779	0.644(-3)	0.00655	0.0340	0.169	0.587	0.00888	0.0576	0.345	0.0782	0.492
1.4	2.152	0.877(-3)	0.00890	0.0462	0.227	0.577	0.0121	0.0782	0.466	0.106	0.630
1.6	2.530	0.00115	0.0116	0.0600	0.289	0.568	0.0158	0.102	0.602	0.138	0.743
1.8	2.894	0.00145	0.0147	0.0756	0.352	0.561	0.0199	0.128	0.747	0.175	0.819
2.0	3.240	0.00179	0.0181	0.0927	0.412	0.556	0.0246	0.158	0.898	0.215	0.864
2.2	3.558	0.00216	0.0218	0.111	0.465	0.551	0.0297	0.190	1.049	0.259	0.879
2.4	3.877	0.00257	0.0259	0.132	0.508	0.547	0.0353	0.225	1.194	0.307	0.901
2.6	4.153	0.00302	0.0304	0.153	0.540	0.544	0.0414	0.263	1.326	0.358	0.893
2.8	4.408	0.00350	0.0351	0.175	0.562	0.542	0.0480	0.303	1.441	0.413	0.885
3.0	4.647	0.00402	0.0402	0.199	0.579	0.539	0.0550	0.345	1.537	0.472	0.877
3.2	4.866	0.00457	0.0456	0.223	0.589	0.537	0.0625	0.390	1.612	0.533	0.870
3.4	5.068	0.00516	0.0514	0.247	0.590	0.536	0.0704	0.437	1.670	0.598	0.863
3.6	5.261	0.00578	0.0574	0.272	0.589	0.534	0.0788	0.485	1.717	0.665	0.857
3.8	5.440	0.00644	0.0637	0.298	0.586	0.534	0.0877	0.535	1.743	0.736	0.851
4.0	5.607	0.00713	0.0703	0.322	0.584	0.533	0.0970	0.586	1.753	0.808	0.846
5	6.437	0.0111	0.108	0.437	0.570	0.529	0.150	0.855	1.754	1.196	0.828
6	7.241	0.0159	0.150	0.519	0.560	0.526	0.213	1.121	1.720	1.600	0.816
7	7.980	0.0216	0.198	0.564	0.552	0.525	0.285	1.351	1.694	1.982	0.809
8	8.608	0.0281	0.247	0.588	0.547	0.524	0.366	1.527	1.671	2.307	0.803
9	9.098	0.0354	0.298	0.588	0.542	0.523	0.453	1.647	1.654	2.558	0.799
10	9.478	0.0434	0.347	0.584	0.539	0.522	0.545	1.723	1.641	2.738	0.795
12	9.930	0.0617	0.435	0.573	0.534	0.521	0.740	1.752	1.622	2.898	0.792
14	10.19	0.0826	0.503	0.565	0.531	0.521	0.937	1.738	1.609	2.911	0.789
16	10.38	0.106	0.546	0.558	0.530	0.521	1.124	1.718	1.599	2.889	0.787
18	10.53	0.131	0.568	0.552	0.528	0.520	1.291	1.699	1.595	2.860	0.785
20	10.65	0.158	0.577	0.548	0.526	0.520	1.430	1.683	1.588	2.832	0.784

M o 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)4d(4)

q1	-----	24.50	6.997	2.752	1.070	0.3032	7.477	2.670	0.9416	2.522	0.6356
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)	4d(4)
0.2	0.0620	0.171(-4)	0.174(-3)	0.900(-3)	0.00432	0.0303	0.237(-3)	0.00151	0.00881	0.00206	0.0137
0.4	0.262	0.686(-4)	0.695(-3)	0.00360	0.0173	0.134	0.949(-3)	0.00603	0.0353	0.00824	0.0552
0.6	0.608	0.154(-3)	0.00156	0.00808	0.0391	0.320	0.00214	0.0136	0.0794	0.0185	0.125
0.8	1.021	0.274(-3)	0.00278	0.0144	0.0698	0.507	0.00380	0.0241	0.141	0.0329	0.225
1.0	1.391	0.429(-3)	0.00434	0.0224	0.109	0.588	0.00593	0.0376	0.220	0.0513	0.352
1.2	1.740	0.618(-3)	0.00624	0.0321	0.156	0.592	0.00853	0.0540	0.316	0.0738	0.501
1.4	2.118	0.840(-3)	0.00849	0.0436	0.211	0.581	0.0116	0.0733	0.427	0.100	0.661
1.6	2.520	0.00110	0.0111	0.0567	0.269	0.572	0.0152	0.0954	0.552	0.131	0.817
1.8	2.923	0.00139	0.0140	0.0714	0.330	0.565	0.0192	0.120	0.688	0.165	0.950
2.0	3.309	0.00171	0.0172	0.0876	0.389	0.558	0.0236	0.148	0.830	0.203	1.051
2.2	3.669	0.00207	0.0208	0.105	0.443	0.554	0.0286	0.178	0.974	0.244	1.120
2.4	3.992	0.00247	0.0247	0.124	0.488	0.549	0.0340	0.211	1.115	0.290	1.153
2.6	4.308	0.00290	0.0290	0.145	0.524	0.546	0.0398	0.247	1.248	0.338	1.189
2.8	4.575	0.00336	0.0335	0.166	0.550	0.543	0.0461	0.284	1.367	0.391	1.191
3.0	4.818	0.00385	0.0384	0.188	0.569	0.541	0.0529	0.324	1.471	0.446	1.184
3.2	5.044	0.00438	0.0435	0.211	0.584	0.539	0.0601	0.366	1.556	0.504	1.175
3.4	5.249	0.00495	0.0490	0.235	0.589	0.537	0.0677	0.410	1.624	0.566	1.167
3.6	5.442	0.00554	0.0548	0.259	0.589	0.535	0.0758	0.456	1.678	0.630	1.159
3.8	5.626	0.00617	0.0608	0.283	0.587	0.534	0.0843	0.503	1.719	0.696	1.152
4.0	5.796	0.00684	0.0671	0.308	0.585	0.534	0.0933	0.552	1.740	0.765	1.145
5	6.640	0.0107	0.103	0.421	0.572	0.529	0.144	0.810	1.796	1.137	1.118
6	7.410	0.0153	0.144	0.507	0.562	0.527	0.205	1.069	1.754	1.528	1.100
7	8.131	0.0207	0.189	0.556	0.554	0.525	0.275	1.300	1.718	1.905	1.088
8	8.765	0.0270	0.238	0.585	0.548	0.524	0.352	1.484	1.693	2.234	1.079
9	9.268	0.0340	0.287	0.589	0.544	0.523	0.437	1.615	1.671	2.496	1.072
10	9.665	0.0417	0.335	0.585	0.540	0.523	0.526	1.702	1.655	2.690	1.067
12	10.16	0.0593	0.423	0.575	0.535	0.522	0.716	1.750	1.633	2.884	1.059
14	10.43	0.0795	0.492	0.566	0.532	0.521	0.909	1.742	1.617	2.911	1.056
16	10.62	0.102	0.539	0.559	0.531	0.521	1.095	1.723	1.606	2.894	1.053
18	10.77	0.127	0.564	0.553	0.528	0.520	1.262	1.705	1.598	2.867	1.050
20	10.90	0.153	0.576	0.549	0.527	0.520	1.404	1.688	1.591	2.840	1.048

T c 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)4d(5)

q1	-----	25.76	7.178	2.843	1.117	0.3114	7.676	2.766	0.9833	2.667	0.6797
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)	4d(5)
0.2	0.0596	0.156(-4)	0.166(-3)	0.851(-3)	0.00403	0.0291	0.226(-3)	0.00142	0.00821	0.00187	0.0137
0.4	0.250	0.624(-4)	0.664(-3)	0.00340	0.0162	0.128	0.904(-3)	0.00567	0.0328	0.00746	0.0550
0.6	0.582	0.140(-3)	0.00149	0.00765	0.0365	0.306	0.00204	0.0127	0.0739	0.0168	0.125
0.8	0.985	0.250(-3)	0.00265	0.0136	0.0650	0.493	0.00362	0.0226	0.131	0.0298	0.223
1.0	1.352	0.390(-3)	0.00414	0.0212	0.102	0.584	0.00565	0.0353	0.205	0.0465	0.349
1.2	1.707	0.562(-3)	0.00596	0.0304	0.146	0.606	0.00813	0.0507	0.294	0.0669	0.499
1.4	2.075	0.765(-3)	0.00811	0.0412	0.196	0.593	0.0111	0.0689	0.398	0.0908	0.667
1.6	2.477	0.999(-3)	0.0106	0.0536	0.252	0.581	0.0144	0.0897	0.515	0.118	0.842
1.8	2.897	0.00126	0.0134	0.0676	0.310	0.572	0.0183	0.113	0.642	0.149	1.010
2.0	3.314	0.00156	0.0165	0.0829	0.367	0.565	0.0225	0.139	0.777	0.184	1.159
2.2	3.711	0.00189	0.0199	0.0997	0.421	0.559	0.0272	0.168	0.915	0.222	1.278
2.4	4.077	0.00225	0.0236	0.118	0.468	0.554	0.0324	0.199	1.052	0.263	1.365
2.6	4.403	0.00263	0.0277	0.137	0.507	0.550	0.0380	0.232	1.184	0.307	1.418
2.8	4.708	0.00305	0.0320	0.157	0.537	0.546	0.0440	0.268	1.305	0.355	1.460
3.0	4.976	0.00351	0.0367	0.179	0.559	0.544	0.0504	0.305	1.413	0.405	1.481
3.2	5.209	0.00399	0.0416	0.201	0.576	0.542	0.0573	0.345	1.505	0.459	1.479
3.4	5.418	0.00450	0.0468	0.223	0.586	0.539	0.0646	0.387	1.581	0.515	1.472
3.6	5.611	0.00504	0.0524	0.246	0.588	0.538	0.0723	0.430	1.641	0.573	1.464
3.8	5.794	0.00562	0.0581	0.270	0.588	0.536	0.0804	0.475	1.690	0.634	1.456
4.0	5.964	0.00622	0.0642	0.294	0.586	0.535	0.0889	0.522	1.723	0.698	1.448
5	6.781	0.00970	0.0983	0.406	0.574	0.529	0.138	0.768	1.804	1.041	1.413
6	7.515	0.0139	0.138	0.494	0.564	0.527	0.196	1.020	1.764	1.411	1.388
7	8.219	0.0189	0.182	0.548	0.556	0.525	0.262	1.252	1.728	1.776	1.371
8	8.853	0.0246	0.228	0.581	0.550	0.525	0.337	1.441	1.700	2.107	1.358
9	9.375	0.0310	0.276	0.588	0.545	0.524	0.418	1.581	1.679	2.384	1.349
10	9.796	0.0380	0.324	0.586	0.542	0.523	0.504	1.678	1.662	2.598	1.341
12	10.35	0.0541	0.412	0.577	0.536	0.522	0.688	1.747	1.637	2.848	1.331
14	10.65	0.0726	0.482	0.568	0.533	0.521	0.877	1.745	1.621	2.906	1.326
16	10.86	0.0934	0.532	0.560	0.531	0.521	1.059	1.728	1.609	2.903	1.320
18	11.01	0.116	0.560	0.555	0.529	0.521	1.227	1.710	1.601	2.880	1.316
20	11.14	0.140	0.573	0.550	0.527	0.520	1.371	1.693	1.593	2.854	1.313

Ru 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(1)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)4d(7)

q1	-----	25.86	7.379	2.906	1.161	0.3027	7.887	2.858	1.020	2.778	0.6662
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(1)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)	4d(7)
0.2	0.0540	0.154(-4)	0.158(-3)	0.819(-3)	0.00379	0.0217	0.215(-3)	0.00134	0.00773	0.00174	0.0166
0.4	0.231	0.619(-4)	0.632(-3)	0.00328	0.0152	0.101	0.860(-3)	0.00535	0.0309	0.00695	0.0664
0.6	0.520	0.139(-3)	0.00142	0.00736	0.0342	0.227	0.00194	0.0120	0.0696	0.0156	0.150
0.8	0.812	0.248(-3)	0.00253	0.0131	0.0610	0.291	0.00344	0.0214	0.124	0.0277	0.268
1.0	1.110	0.387(-3)	0.00394	0.0204	0.0953	0.296	0.00538	0.0333	0.193	0.0433	0.419
1.2	1.457	0.558(-3)	0.00567	0.0293	0.137	0.289	0.00774	0.0479	0.277	0.0622	0.601
1.4	1.858	0.759(-3)	0.00771	0.0397	0.184	0.284	0.0105	0.0651	0.375	0.0846	0.807
1.6	2.301	0.991(-3)	0.0101	0.0517	0.237	0.280	0.0137	0.0848	0.485	0.110	1.028
1.8	2.768	0.00125	0.0127	0.0651	0.292	0.277	0.0174	0.107	0.606	0.139	1.251
2.0	3.239	0.00155	0.0157	0.0799	0.348	0.274	0.0214	0.132	0.734	0.171	1.461
2.2	3.693	0.00187	0.0189	0.0961	0.402	0.272	0.0259	0.159	0.867	0.207	1.645
2.4	4.115	0.00223	0.0225	0.114	0.450	0.271	0.0308	0.188	1.000	0.245	1.793
2.6	4.496	0.00262	0.0263	0.132	0.491	0.269	0.0361	0.220	1.129	0.286	1.903
2.8	4.829	0.00303	0.0305	0.152	0.524	0.268	0.0419	0.253	1.251	0.331	1.975
3.0	5.138	0.00348	0.0349	0.172	0.548	0.267	0.0480	0.289	1.362	0.378	2.036
3.2	5.402	0.00396	0.0396	0.194	0.567	0.267	0.0545	0.327	1.459	0.428	2.064
3.4	5.625	0.00447	0.0446	0.216	0.581	0.266	0.0615	0.366	1.540	0.480	2.065
3.6	5.822	0.00501	0.0499	0.238	0.586	0.266	0.0688	0.407	1.606	0.535	2.060
3.8	6.005	0.00558	0.0554	0.261	0.587	0.265	0.0765	0.450	1.661	0.592	2.051
4.0	6.177	0.00618	0.0612	0.284	0.587	0.265	0.0847	0.494	1.702	0.652	2.041
5	6.951	0.00963	0.0937	0.395	0.576	0.263	0.131	0.731	1.781	0.976	1.994
6	7.678	0.0138	0.132	0.485	0.566	0.262	0.187	0.976	1.770	1.329	1.958
7	8.360	0.0188	0.174	0.542	0.558	0.262	0.250	1.206	1.735	1.683	1.931
8	8.986	0.0244	0.219	0.577	0.551	0.261	0.322	1.400	1.707	2.013	1.912
9	9.517	0.0307	0.265	0.588	0.547	0.261	0.399	1.548	1.684	2.298	1.897
10	9.952	0.0378	0.312	0.586	0.543	0.261	0.482	1.653	1.667	2.525	1.886
12	10.55	0.0537	0.399	0.578	0.537	0.260	0.660	1.742	1.641	2.811	1.869
14	10.88	0.0721	0.471	0.569	0.534	0.260	0.843	1.746	1.624	2.897	1.858
16	11.10	0.0927	0.523	0.561	0.532	0.260	1.023	1.732	1.612	2.905	1.853
18	11.26	0.115	0.554	0.556	0.530	0.260	1.190	1.714	1.603	2.888	1.846
20	11.38	0.139	0.571	0.551	0.528	0.260	1.337	1.698	1.596	2.864	1.842

R_h 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(1)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)4d(8)

q1	-----	26.37	7.555	3.000	1.202	0.3040	8.089	2.953	1.065	2.884	0.7091
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(1)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)	4d(8)
0.2	0.0523	0.149(-4)	0.151(-3)	0.775(-3)	0.00358	0.0215	0.205(-3)	0.00126	0.00720	0.00163	0.0159
0.4	0.223	0.597(-4)	0.605(-3)	0.00310	0.0144	0.100	0.821(-3)	0.00505	0.0288	0.00650	0.0639
0.6	0.504	0.134(-3)	0.00136	0.00697	0.0324	0.226	0.00185	0.0114	0.0648	0.0146	0.144
0.8	0.785	0.239(-3)	0.00242	0.0124	0.0576	0.291	0.00328	0.0202	0.115	0.0260	0.257
1.0	1.067	0.373(-3)	0.00378	0.0193	0.0899	0.296	0.00513	0.0315	0.180	0.0405	0.401
1.2	1.396	0.538(-3)	0.00544	0.0277	0.129	0.289	0.00739	0.0452	0.258	0.0583	0.575
1.4	1.779	0.732(-3)	0.00739	0.0376	0.174	0.284	0.0101	0.0615	0.349	0.0791	0.776
1.6	2.207	0.955(-3)	0.00964	0.0489	0.224	0.280	0.0131	0.0801	0.452	0.103	0.995
1.8	2.667	0.00121	0.0122	0.0616	0.277	0.277	0.0166	0.101	0.565	0.130	1.225
2.0	3.142	0.00149	0.0150	0.0757	0.332	0.274	0.0205	0.124	0.686	0.160	1.454
2.2	3.616	0.00181	0.0182	0.0911	0.384	0.272	0.0247	0.150	0.812	0.193	1.668
2.4	4.070	0.00215	0.0216	0.108	0.433	0.271	0.0294	0.178	0.940	0.229	1.859
2.6	4.491	0.00252	0.0253	0.125	0.475	0.269	0.0345	0.208	1.066	0.268	2.017
2.8	4.870	0.00292	0.0292	0.144	0.510	0.268	0.0400	0.239	1.187	0.310	2.139
3.0	5.204	0.00335	0.0335	0.164	0.537	0.267	0.0458	0.273	1.300	0.354	2.226
3.2	5.509	0.00382	0.0380	0.184	0.558	0.267	0.0521	0.309	1.400	0.401	2.296
3.4	5.775	0.00431	0.0428	0.205	0.574	0.266	0.0587	0.347	1.488	0.450	2.339
3.6	5.994	0.00483	0.0478	0.227	0.583	0.266	0.0657	0.386	1.561	0.502	2.350
3.8	6.186	0.00537	0.0531	0.249	0.586	0.265	0.0731	0.427	1.621	0.556	2.350
4.0	6.365	0.00595	0.0587	0.271	0.587	0.265	0.0809	0.469	1.671	0.612	2.346
5	7.116	0.00928	0.0900	0.380	0.578	0.263	0.125	0.695	1.757	0.919	2.299
6	7.842	0.0133	0.127	0.471	0.568	0.262	0.178	0.933	1.777	1.257	2.257
7	8.506	0.0181	0.167	0.533	0.559	0.262	0.239	1.160	1.742	1.600	2.225
8	9.124	0.0235	0.211	0.570	0.553	0.261	0.308	1.357	1.713	1.927	2.200
9	9.663	0.0296	0.256	0.586	0.548	0.261	0.382	1.512	1.691	2.215	2.182
10	10.11	0.0364	0.302	0.587	0.544	0.261	0.462	1.625	1.673	2.452	2.167
12	10.75	0.0519	0.388	0.579	0.538	0.260	0.634	1.734	1.646	2.769	2.146
14	11.10	0.0697	0.461	0.570	0.534	0.260	0.813	1.747	1.628	2.885	2.132
16	11.33	0.0895	0.515	0.563	0.533	0.260	0.990	1.735	1.615	2.905	2.126
18	11.50	0.111	0.549	0.557	0.530	0.260	1.156	1.719	1.606	2.897	2.117
20	11.63	0.135	0.568	0.552	0.528	0.260	1.304	1.702	1.598	2.874	2.110

Pd 1s(2)2s(2)3s(2)4S(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)4d(8)

q1	-----	26.89	7.731	3.096	1.255	0.3359	8.288	3.051	1.125	2.980	0.7940
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)	4d(8)
0.2	0.0529	0.143(-4)	0.145(-3)	0.734(-3)	0.00334	0.0259	0.196(-3)	0.00119	0.00658	0.00153	0.0133
0.4	0.221	0.575(-4)	0.580(-3)	0.00293	0.0134	0.113	0.785(-3)	0.00477	0.0263	0.00613	0.0531
0.6	0.513	0.129(-3)	0.00131	0.00660	0.0301	0.269	0.00177	0.0107	0.0592	0.0138	0.120
0.8	0.885	0.230(-3)	0.00232	0.0117	0.0536	0.452	0.00314	0.0191	0.105	0.0245	0.213
1.0	1.239	0.360(-3)	0.00362	0.0183	0.0837	0.563	0.00491	0.0297	0.164	0.0382	0.333
1.2	1.572	0.518(-3)	0.00521	0.0263	0.120	0.603	0.00706	0.0427	0.235	0.0550	0.477
1.4	1.908	0.705(-3)	0.00709	0.0356	0.162	0.597	0.00961	0.0580	0.318	0.0747	0.645
1.6	2.281	0.921(-3)	0.00925	0.0464	0.209	0.586	0.0125	0.0756	0.413	0.0974	0.831
1.8	2.689	0.00117	0.0117	0.0584	0.260	0.576	0.0159	0.0954	0.517	0.123	1.031
2.0	3.122	0.00144	0.0144	0.0718	0.311	0.568	0.0196	0.117	0.629	0.151	1.238
2.2	3.567	0.00174	0.0174	0.0863	0.363	0.563	0.0237	0.142	0.746	0.183	1.442
2.4	4.009	0.00207	0.0207	0.102	0.411	0.557	0.0281	0.168	0.867	0.217	1.636
2.6	4.435	0.00243	0.0242	0.119	0.455	0.553	0.0330	0.196	0.989	0.253	1.811
2.8	4.834	0.00281	0.0281	0.137	0.492	0.550	0.0382	0.226	1.107	0.293	1.961
3.0	5.199	0.00323	0.0321	0.155	0.524	0.546	0.0438	0.259	1.219	0.335	2.083
3.2	5.525	0.00367	0.0365	0.175	0.546	0.544	0.0498	0.292	1.323	0.379	2.177
3.4	5.822	0.00415	0.0411	0.195	0.564	0.542	0.0561	0.328	1.416	0.426	2.251
3.6	6.090	0.00465	0.0459	0.216	0.577	0.540	0.0629	0.365	1.497	0.475	2.307
3.8	6.312	0.00518	0.0510	0.237	0.583	0.538	0.0699	0.404	1.565	0.526	2.332
4.0	6.506	0.00574	0.0563	0.259	0.585	0.537	0.0774	0.444	1.622	0.579	2.341
5	7.296	0.00895	0.0865	0.365	0.581	0.530	0.120	0.661	1.745	0.872	2.327
6	8.016	0.0129	0.122	0.456	0.570	0.528	0.171	0.891	1.784	1.196	2.283
7	8.662	0.0174	0.161	0.523	0.562	0.526	0.229	1.115	1.751	1.529	2.248
8	9.271	0.0227	0.203	0.563	0.555	0.525	0.295	1.313	1.722	1.851	2.221
9	9.815	0.0286	0.248	0.584	0.550	0.524	0.367	1.474	1.699	2.141	2.200
10	10.27	0.0351	0.292	0.587	0.546	0.523	0.444	1.595	1.680	2.386	2.183
12	10.94	0.0500	0.378	0.580	0.540	0.522	0.610	1.724	1.652	2.726	2.158
14	11.32	0.0672	0.451	0.572	0.535	0.521	0.785	1.746	1.633	2.870	2.142
16	11.56	0.0865	0.507	0.564	0.533	0.521	0.959	1.739	1.620	2.903	2.130
18	11.75	0.108	0.544	0.558	0.531	0.521	1.123	1.723	1.610	2.905	2.125
20	11.88	0.130	0.565	0.553	0.529	0.520	1.272	1.707	1.602	2.883	2.116

A g 1s(2)2s(2)3s(2)4S(2)5s(1)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)4d(10)

q1	-----	28.25	7.886	3.180	1.278	0.3045	8.456	3.126	1.138	3.034	0.7370
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(1)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)	4d(10)
0.2	0.0514	0.131(-4)	0.140(-3)	0.701(-3)	0.00324	0.0215	0.189(-3)	0.00114	0.00645	0.00149	0.0166
0.4	0.220	0.524(-4)	0.560(-3)	0.00280	0.0130	0.100	0.757(-3)	0.00457	0.0258	0.00594	0.0664
0.6	0.496	0.118(-3)	0.00126	0.00630	0.0293	0.226	0.00170	0.0103	0.0580	0.0134	0.150
0.8	0.771	0.210(-3)	0.00224	0.0112	0.0520	0.291	0.00303	0.0183	0.103	0.0237	0.266
1.0	1.045	0.328(-3)	0.00350	0.0175	0.0812	0.296	0.00473	0.0285	0.161	0.0370	0.416
1.2	1.350	0.472(-3)	0.00503	0.0251	0.117	0.289	0.00681	0.0409	0.231	0.0533	0.597
1.4	1.739	0.642(-3)	0.00684	0.0340	0.158	0.284	0.00926	0.0556	0.312	0.0724	0.806
1.6	2.160	0.839(-3)	0.00893	0.0443	0.203	0.280	0.0121	0.0725	0.405	0.0943	1.039
1.8	2.619	0.00106	0.0113	0.0558	0.252	0.277	0.0153	0.0915	0.507	0.119	1.289
2.0	3.104	0.00131	0.0139	0.0686	0.303	0.274	0.0189	0.113	0.617	0.147	1.547
2.2	3.599	0.00159	0.0168	0.0825	0.354	0.272	0.0228	0.136	0.733	0.177	1.803
2.4	4.088	0.00189	0.0200	0.0975	0.402	0.271	0.0271	0.161	0.853	0.210	2.045
2.6	4.556	0.00221	0.0234	0.114	0.446	0.269	0.0318	0.188	0.973	0.246	2.264
2.8	4.992	0.00257	0.0271	0.131	0.484	0.268	0.0368	0.217	1.090	0.284	2.452
3.0	5.387	0.00295	0.0310	0.149	0.516	0.268	0.0422	0.248	1.202	0.324	2.604
3.2	5.736	0.00335	0.0352	0.168	0.540	0.267	0.0480	0.281	1.306	0.367	2.721
3.4	6.051	0.00378	0.0396	0.187	0.559	0.266	0.0541	0.315	1.400	0.413	2.814
3.6	6.333	0.00424	0.0443	0.207	0.574	0.266	0.0606	0.351	1.482	0.460	2.883
3.8	6.561	0.00472	0.0492	0.228	0.582	0.265	0.0674	0.388	1.552	0.510	2.915
4.0	6.757	0.00523	0.0544	0.249	0.585	0.265	0.0746	0.427	1.611	0.562	2.926
5	7.540	0.00815	0.0835	0.353	0.584	0.263	0.116	0.636	1.742	0.847	2.908
6	8.238	0.0117	0.118	0.445	0.573	0.262	0.165	0.861	1.786	1.163	2.854
7	8.867	0.0159	0.154	0.514	0.563	0.262	0.221	1.081	1.752	1.491	2.810
8	9.467	0.0207	0.197	0.556	0.557	0.261	0.285	1.280	1.724	1.810	2.776
9	10.01	0.0261	0.240	0.581	0.551	0.261	0.355	1.445	1.700	2.100	2.750
10	10.47	0.0321	0.284	0.586	0.547	0.261	0.429	1.571	1.682	2.348	2.729
12	11.15	0.0457	0.369	0.581	0.540	0.260	0.591	1.714	1.654	2.700	2.698
14	11.55	0.0615	0.442	0.573	0.536	0.260	0.762	1.744	1.634	2.859	2.677
16	11.80	0.0792	0.500	0.566	0.533	0.260	0.933	1.741	1.620	2.900	2.663
18	11.99	0.0987	0.539	0.559	0.531	0.260	1.096	1.726	1.610	2.910	2.656
20	12.12	0.120	0.561	0.554	0.529	0.260	1.245	1.711	1.603	2.890	2.646

C d 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)3d(10)4d(10)

q1	-----	28.11	8.103	3.298	1.344	0.3492	8.694	3.241	1.213	3.209	0.8742
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	3d(10)	4d(10)
0.2	0.0492	0.132(-4)	0.133(-3)	0.658(-3)	0.00299	0.0245	0.180(-3)	0.00107	0.00580	0.00134	0.0126
0.4	0.205	0.529(-4)	0.533(-3)	0.00263	0.0120	0.106	0.719(-3)	0.00429	0.0232	0.00538	0.0502
0.6	0.475	0.119(-3)	0.00120	0.00592	0.0269	0.252	0.00162	0.0964	0.0522	0.0121	0.113
0.8	0.826	0.212(-3)	0.00213	0.0105	0.0479	0.431	0.00288	0.0171	0.0927	0.0215	0.201
1.0	1.168	0.331(-3)	0.00333	0.0164	0.0747	0.551	0.00449	0.0267	0.145	0.0335	0.313
1.2	1.476	0.476(-3)	0.00479	0.0235	0.107	0.590	0.00647	0.0384	0.207	0.0482	0.449
1.4	1.798	0.648(-3)	0.00651	0.0319	0.145	0.598	0.00880	0.0522	0.281	0.0655	0.608
1.6	2.142	0.847(-3)	0.00850	0.0416	0.187	0.587	0.0115	0.0680	0.364	0.0854	0.787
1.8	2.523	0.00107	0.0107	0.0524	0.233	0.578	0.0145	0.0859	0.457	0.108	0.983
2.0	2.936	0.00132	0.0132	0.0644	0.281	0.570	0.0179	0.106	0.557	0.133	1.193
2.2	3.371	0.00160	0.0160	0.0775	0.330	0.564	0.0217	0.128	0.663	0.160	1.410
2.4	3.818	0.00190	0.0190	0.0917	0.377	0.558	0.0258	0.151	0.774	0.190	1.629
2.6	4.266	0.00223	0.0223	0.107	0.421	0.554	0.0302	0.177	0.887	0.223	1.843
2.8	4.704	0.00259	0.0258	0.123	0.461	0.550	0.0350	0.204	0.999	0.257	2.046
3.0	5.122	0.00297	0.0295	0.140	0.495	0.547	0.0402	0.233	1.109	0.294	2.232
3.2	5.514	0.00338	0.0335	0.158	0.523	0.545	0.0456	0.264	1.213	0.333	2.396
3.4	5.872	0.00382	0.0378	0.176	0.545	0.542	0.0515	0.296	1.310	0.375	2.585
3.6	6.198	0.00428	0.0422	0.195	0.562	0.540	0.0576	0.330	1.398	0.418	2.650
3.8	6.493	0.00476	0.0469	0.215	0.575	0.539	0.0641	0.365	1.475	0.464	2.744
4.0	6.755	0.00528	0.0519	0.235	0.581	0.537	0.0709	0.402	1.542	0.511	2.819
5	7.706	0.00823	0.0797	0.336	0.597	0.531	0.110	0.601	1.724	0.773	2.946
6	8.449	0.0118	0.112	0.429	0.583	0.529	0.157	0.817	1.791	1.066	2.954
7	9.039	0.0160	0.149	0.500	0.572	0.526	0.211	1.032	1.762	1.375	2.896
8	9.612	0.0209	0.189	0.547	0.564	0.525	0.271	1.230	1.734	1.683	2.849
9	10.15	0.0263	0.231	0.576	0.557	0.524	0.338	1.399	1.710	1.971	2.811
10	10.61	0.0324	0.273	0.585	0.551	0.523	0.410	1.533	1.691	2.227	2.782
12	11.32	0.0461	0.356	0.582	0.544	0.522	0.565	1.696	1.661	2.611	2.739
14	11.77	0.0621	0.430	0.575	0.539	0.521	0.731	1.741	1.641	2.818	2.709
16	12.04	0.0799	0.489	0.567	0.535	0.521	0.898	1.743	1.626	2.888	2.689
18	12.23	0.0996	0.531	0.561	0.532	0.521	1.059	1.731	1.615	2.905	2.674
20	12.41	0.121	0.557	0.556	0.530	0.520	1.208	1.716	1.607	2.937	2.661

I n 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)5p(1)3d(10)4d(10)

q1	-----	28.77	8.289	3.378	1.403	0.4054	8.905	3.344	1.264	0.3020	3.317	0.9545
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	5p(1)	3d(10)	4d(10)
0.2	0.0636	0.126(-4)	0.128(-3)	0.631(-3)	0.00279	0.0195	0.172(-3)	0.00101	0.00542	0.0218	0.00127	0.0109
0.4	0.273	0.506(-4)	0.512(-3)	0.00253	0.0112	0.0825	0.688(-3)	0.00406	0.0217	0.102	0.00507	0.0434
0.6	0.624	0.114(-3)	0.00115	0.00568	0.0251	0.196	0.00155	0.00912	0.0487	0.228	0.0114	0.0976
0.8	0.995	0.203(-3)	0.00205	0.0101	0.0446	0.347	0.00275	0.0162	0.0865	0.292	0.0202	0.173
1.0	1.339	0.317(-3)	0.00319	0.0157	0.0696	0.488	0.00430	0.0253	0.135	0.296	0.0316	0.270
1.2	1.654	0.456(-3)	0.00460	0.0226	0.0999	0.567	0.00619	0.0364	0.194	0.289	0.0455	0.388
1.4	1.962	0.620(-3)	0.00625	0.0307	0.135	0.598	0.00842	0.0494	0.262	0.284	0.0618	0.525
1.6	2.272	0.810(-3)	0.00816	0.0399	0.175	0.592	0.0110	0.0644	0.340	0.280	0.0805	0.681
1.8	2.616	0.00103	0.0103	0.0503	0.218	0.584	0.0139	0.0813	0.427	0.277	0.102	0.853
2.0	2.991	0.00127	0.0127	0.0618	0.263	0.576	0.0172	0.100	0.521	0.274	0.125	1.038
2.2	3.390	0.00153	0.0154	0.0744	0.310	0.570	0.0207	0.121	0.621	0.272	0.151	1.233
2.4	3.805	0.00182	0.0183	0.0881	0.356	0.564	0.0247	0.143	0.726	0.271	0.180	1.433
2.6	4.229	0.00214	0.0214	0.103	0.400	0.559	0.0289	0.167	0.834	0.269	0.210	1.634
2.8	4.652	0.00248	0.0248	0.118	0.440	0.555	0.0335	0.193	0.943	0.268	0.243	1.830
3.0	5.065	0.00285	0.0284	0.135	0.476	0.552	0.0384	0.221	1.050	0.267	0.278	2.017
3.2	5.461	0.00324	0.0322	0.152	0.506	0.549	0.0437	0.250	1.153	0.266	0.315	2.190
3.4	5.833	0.00365	0.0363	0.170	0.531	0.547	0.0492	0.281	1.250	0.266	0.354	2.346
3.6	6.178	0.00409	0.0406	0.188	0.550	0.544	0.0551	0.313	1.340	0.266	0.395	2.482
3.8	6.494	0.00456	0.0451	0.207	0.566	0.542	0.0614	0.346	1.422	0.265	0.438	2.597
4.0	6.781	0.00505	0.0498	0.226	0.576	0.541	0.0679	0.381	1.493	0.265	0.483	2.693
5	7.830	0.00788	0.0766	0.325	0.602	0.534	0.105	0.572	1.706	0.263	0.732	2.905
6	8.624	0.0113	0.108	0.417	0.587	0.532	0.150	0.780	1.789	0.262	1.012	2.975
7	9.205	0.0154	0.144	0.491	0.576	0.528	0.202	0.990	1.768	0.262	1.310	2.919
8	9.765	0.0200	0.182	0.540	0.566	0.526	0.260	1.187	1.741	0.261	1.610	2.872
9	10.29	0.0252	0.223	0.572	0.559	0.526	0.324	1.359	1.717	0.261	1.895	2.833
10	10.76	0.0310	0.264	0.584	0.554	0.525	0.394	1.498	1.697	0.261	2.153	2.801
12	11.50	0.0442	0.346	0.583	0.546	0.523	0.544	1.677	1.666	0.260	2.553	2.755
14	11.97	0.0595	0.420	0.576	0.540	0.522	0.705	1.735	1.645	0.260	2.786	2.723
16	12.26	0.0767	0.481	0.569	0.536	0.521	0.868	1.743	1.630	0.260	2.876	2.700
18	12.46	0.0956	0.524	0.562	0.533	0.521	1.027	1.735	1.618	0.260	2.902	2.683
20	12.69	0.116	0.552	0.557	0.531	0.521	1.176	1.721	1.609	0.260	2.972	2.670

S n 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)5p(2)3d(10)4d(10)

q1	-----	29.38	8.482	3.480	1.460	0.4511	9.103	3.442	1.326	0.3537	3.415	1.035
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	5p(2)	3d(10)	4d(10)
0.2	0.0607	0.121(-4)	0.123(-3)	0.600(-3)	0.00261	0.0166	0.165(-3)	0.963(-3)	0.00500	0.0240	0.00120	0.00949
0.4	0.253	0.486(-4)	0.491(-3)	0.00240	0.0104	0.0692	0.660(-3)	0.00385	0.0200	0.103	0.00481	0.0379
0.6	0.590	0.110(-3)	0.00110	0.00539	0.0235	0.163	0.00149	0.00867	0.0450	0.246	0.0108	0.0853
0.8	1.037	0.195(-3)	0.00196	0.00957	0.0417	0.293	0.00264	0.0154	0.0798	0.422	0.0192	0.152
1.0	1.479	0.304(-3)	0.00306	0.0149	0.0651	0.430	0.00413	0.0240	0.124	0.546	0.0300	0.236
1.2	1.840	0.438(-3)	0.00441	0.0215	0.0935	0.531	0.00594	0.0346	0.179	0.588	0.0432	0.339
1.4	2.154	0.596(-3)	0.00600	0.0291	0.126	0.578	0.00808	0.0469	0.242	0.598	0.0587	0.459
1.6	2.449	0.779(-3)	0.00782	0.0379	0.164	0.594	0.0106	0.0612	0.314	0.588	0.0765	0.596
1.8	2.757	0.986(-3)	0.00989	0.0478	0.204	0.588	0.0134	0.0772	0.394	0.578	0.0966	0.747
2.0	3.094	0.00122	0.0122	0.0588	0.248	0.581	0.0165	0.0951	0.482	0.570	0.119	0.911
2.2	3.457	0.00147	0.0147	0.0707	0.292	0.574	0.0199	0.115	0.576	0.564	0.144	1.085
2.4	3.839	0.00175	0.0175	0.0837	0.337	0.569	0.0237	0.136	0.674	0.559	0.171	1.267
2.6	4.234	0.00206	0.0205	0.0976	0.380	0.564	0.0278	0.159	0.776	0.554	0.120	1.453
2.8	4.634	0.00238	0.0238	0.113	0.421	0.560	0.0322	0.184	0.879	0.551	0.231	1.638
3.0	5.033	0.00274	0.0272	0.128	0.458	0.556	0.0369	0.210	0.983	0.548	0.264	1.820
3.2	5.422	0.00311	0.0309	0.145	0.490	0.553	0.0419	0.238	1.084	0.545	0.299	1.993
3.4	5.796	0.00351	0.0348	0.162	0.516	0.550	0.0473	0.267	1.181	0.543	0.336	2.156
3.6	6.150	0.00394	0.0389	0.179	0.538	0.548	0.0530	0.298	1.272	0.541	0.376	2.303
3.8	6.481	0.00438	0.0433	0.198	0.556	0.546	0.0589	0.330	1.356	0.539	0.417	2.434
4.0	6.786	0.00486	0.0478	0.216	0.569	0.544	0.0652	0.363	1.432	0.538	0.459	2.548
5	7.946	0.00757	0.0736	0.312	0.596	0.537	0.101	0.546	1.679	0.531	0.697	2.866
6	8.785	0.0109	0.104	0.403	0.590	0.532	0.144	0.747	1.775	0.529	0.966	2.985
7	9.380	0.0148	0.138	0.478	0.578	0.530	0.194	0.952	1.774	0.526	1.254	2.940
8	9.932	0.0192	0.175	0.531	0.568	0.528	0.250	1.147	1.748	0.525	1.547	2.893
9	10.46	0.0242	0.215	0.565	0.561	0.526	0.312	1.320	1.724	0.525	1.828	2.854
10	10.93	0.0298	0.255	0.582	0.555	0.526	0.379	1.464	1.704	0.524	2.087	2.821
12	11.68	0.0425	0.336	0.584	0.547	0.524	0.525	1.656	1.673	0.522	2.498	2.771
14	12.18	0.0573	0.410	0.577	0.541	0.523	0.681	1.729	1.650	0.522	2.753	2.737
16	12.49	0.0739	0.471	0.570	0.537	0.522	0.841	1.743	1.634	0.521	2.863	2.712
18	12.70	0.0921	0.517	0.564	0.534	0.521	0.998	1.739	1.622	0.521	2.898	2.693
20	12.92	0.112	0.547	0.558	0.532	0.521	1.146	1.725	1.613	0.521	2.968	2.679

S b 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)5p(3)3d(10)4d(10)

q1	-----	30.03	8.664	3.572	1.520	0.4933	9.302	3.539	1.391	0.4000	3.520	1.111
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	5p(3)	3d(10)	4d(10)
0.2	0.0572	0.116(-4)	0.118(-3)	0.573(-3)	0.00244	0.0145	0.158(-3)	0.917(-3)	0.00462	0.0243	0.00114	0.00843
0.4	0.235	0.466(-4)	0.472(-3)	0.00229	0.00977	0.0599	0.634(-3)	0.00367	0.0185	0.101	0.00456	0.0337
0.6	0.543	0.105(-3)	0.00106	0.00515	0.0220	0.140	0.00143	0.00825	0.0415	0.238	0.0103	0.0758
0.8	0.974	0.187(-3)	0.00189	0.00915	0.0390	0.253	0.00254	0.0147	0.0736	0.428	0.0182	0.135
1.0	1.472	0.292(-3)	0.00295	0.0143	0.0609	0.381	0.00396	0.0229	0.115	0.633	0.0284	0.210
1.2	1.937	0.420(-3)	0.00424	0.0205	0.0874	0.491	0.00571	0.0329	0.165	0.788	0.0409	0.301
1.4	2.312	0.572(-3)	0.00577	0.0278	0.118	0.558	0.00777	0.0447	0.223	0.863	0.0556	0.408
1.6	2.639	0.747(-3)	0.00753	0.0362	0.153	0.590	0.0101	0.0583	0.290	0.891	0.0725	0.529
1.8	2.927	0.946(-3)	0.00952	0.0457	0.192	0.590	0.0128	0.0736	0.364	0.883	0.0915	0.664
2.0	3.235	0.00117	0.0117	0.0562	0.232	0.585	0.0158	0.0906	0.445	0.872	0.113	0.812
2.2	3.566	0.00141	0.0142	0.0677	0.275	0.579	0.0191	0.109	0.533	0.863	0.136	0.969
2.4	3.918	0.00168	0.0169	0.0801	0.318	0.573	0.0228	0.130	0.625	0.854	0.162	1.135
2.6	4.285	0.00197	0.0198	0.0934	0.361	0.568	0.0267	0.152	0.721	0.847	0.189	1.306
2.8	4.661	0.00229	0.0229	0.108	0.401	0.564	0.0309	0.175	0.819	0.841	0.219	1.480
3.0	5.041	0.00262	0.0262	0.123	0.438	0.560	0.0355	0.200	0.918	0.835	0.250	1.653
3.2	5.418	0.00299	0.0297	0.138	0.472	0.556	0.0403	0.227	1.016	0.830	0.284	1.822
3.4	5.785	0.00337	0.0335	0.155	0.500	0.553	0.0455	0.255	1.111	0.826	0.319	1.984
3.6	6.139	0.00378	0.0375	0.172	0.524	0.551	0.0509	0.284	1.202	0.822	0.356	2.136
3.8	6.476	0.00421	0.0417	0.189	0.544	0.548	0.0567	0.315	1.288	0.819	0.395	2.275
4.0	6.793	0.00466	0.0460	0.208	0.560	0.546	0.0627	0.347	1.367	0.816	0.436	2.401
5	8.041	0.00727	0.0709	0.301	0.587	0.539	0.0972	0.522	1.644	0.806	0.663	2.806
6	8.912	0.0104	0.100	0.391	0.592	0.534	0.139	0.716	1.747	0.799	0.921	2.963
7	9.557	0.0142	0.133	0.467	0.580	0.532	0.187	0.916	1.779	0.796	1.198	2.956
8	10.10	0.0185	0.169	0.522	0.571	0.529	0.241	1.108	1.755	0.792	1.482	2.912
9	10.62	0.0233	0.208	0.559	0.563	0.527	0.301	1.282	1.732	0.789	1.760	2.872
10	11.09	0.0286	0.247	0.579	0.557	0.526	0.365	1.429	1.711	0.789	2.017	2.838
12	11.86	0.0409	0.327	0.584	0.548	0.525	0.507	1.634	1.679	0.786	2.438	2.786
14	12.38	0.0550	0.400	0.578	0.542	0.523	0.659	1.721	1.656	0.784	2.715	2.749
16	12.71	0.0710	0.462	0.571	0.538	0.522	0.815	1.741	1.639	0.783	2.845	2.723
18	12.94	0.0886	0.510	0.565	0.535	0.522	0.970	1.743	1.626	0.782	2.892	2.708
20	13.12	0.108	0.542	0.559	0.533	0.521	1.117	1.730	1.616	0.782	2.927	2.687

Te 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)5p(4)3d(10)4d(10)

q1	30.54	8.844	3.664	1.579	0.5338	9.498	3.637	1.449	0.4295	3.624	1.185	
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	5p(4)	3d(10)	4d(10)
0.2	0.0547	0.113(-4)	0.114(-3)	0.548(-3)	0.00229	0.0128	0.153(-3)	0.874(-3)	0.00430	0.0250	0.00108	0.00755
0.4	0.223	0.453(-4)	0.455(-3)	0.00219	0.00906	0.0528	0.611(-3)	0.00349	0.0171	0.103	0.00433	0.0300
0.6	0.513	0.102(-3)	0.00102	0.00491	0.0206	0.123	0.00138	0.00785	0.0384	0.239	0.00972	0.0675
0.8	0.924	0.181(-3)	0.00182	0.00868	0.0366	0.221	0.00245	0.0139	0.0686	0.433	0.0173	0.120
1.0	1.424	0.283(-3)	0.00284	0.0136	0.0571	0.339	0.00382	0.0217	0.107	0.664	0.0269	0.188
1.2	1.944	0.408(-3)	0.00408	0.0195	0.0820	0.451	0.00550	0.0311	0.154	0.888	0.0387	0.270
1.4	2.404	0.555(-3)	0.00555	0.0266	0.111	0.532	0.00748	0.0423	0.208	1.053	0.0524	0.365
1.6	2.783	0.725(-3)	0.00723	0.0346	0.144	0.575	0.00976	0.0553	0.270	1.144	0.0683	0.475
1.8	3.108	0.918(-3)	0.00914	0.0437	0.180	0.591	0.0123	0.0699	0.340	1.178	0.0865	0.596
2.0	3.425	0.00113	0.0113	0.0537	0.219	0.596	0.0152	0.0861	0.416	1.192	0.107	0.729
2.2	3.729	0.00137	0.0136	0.0646	0.259	0.590	0.0184	0.104	0.497	1.180	0.129	0.872
2.4	4.050	0.00163	0.0162	0.0765	0.301	0.583	0.0219	0.123	0.584	1.167	0.153	1.023
2.6	4.388	0.00191	0.0190	0.0893	0.342	0.577	0.0256	0.144	0.675	1.156	0.179	1.180
2.8	4.738	0.00222	0.0220	0.103	0.382	0.572	0.0297	0.167	0.768	1.145	0.207	1.341
3.0	5.095	0.00255	0.0252	0.117	0.419	0.567	0.0340	0.191	0.862	1.136	0.237	1.503
3.2	5.453	0.00290	0.0286	0.132	0.453	0.563	0.0387	0.216	0.957	1.128	0.269	1.665
3.4	5.807	0.00327	0.0322	0.148	0.483	0.560	0.0436	0.242	1.049	1.121	0.303	1.822
3.6	6.152	0.00366	0.0361	0.164	0.508	0.557	0.0488	0.270	1.139	1.114	0.338	1.973
3.8	6.483	0.00408	0.0401	0.181	0.529	0.554	0.0544	0.299	1.224	1.109	0.375	2.114
4.0	6.798	0.00452	0.0443	0.198	0.544	0.551	0.0602	0.330	1.304	1.104	0.413	2.245
5	8.151	0.00704	0.0683	0.290	0.584	0.551	0.0936	0.499	1.607	1.095	0.631	2.726
6	9.044	0.0101	0.0966	0.379	0.594	0.552	0.134	0.686	1.729	1.082	0.878	2.904
7	9.733	0.0137	0.129	0.456	0.583	0.533	0.180	0.881	1.781	1.066	1.146	2.966
8	10.28	0.0179	0.164	0.513	0.573	0.531	0.232	1.071	1.761	1.063	1.422	2.929
9	10.78	0.0226	0.201	0.553	0.565	0.528	0.290	1.245	1.739	1.057	1.694	2.890
10	11.27	0.0277	0.240	0.576	0.559	0.530	0.352	1.395	1.718	1.066	1.950	2.856
12	12.03	0.0396	0.318	0.584	0.550	0.525	0.489	1.610	1.685	1.051	2.379	2.802
14	12.58	0.0533	0.391	0.579	0.544	0.524	0.637	1.711	1.661	1.048	2.672	2.763
16	12.93	0.0688	0.453	0.572	0.539	0.523	0.790	1.737	1.644	1.047	2.822	2.734
18	13.16	0.0859	0.502	0.566	0.536	0.522	0.942	1.736	1.630	1.045	2.877	2.712
20	13.32	0.104	0.536	0.561	0.533	0.522	1.087	1.727	1.620	1.044	2.889	2.696

I 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)5p(5)3d(10)4d(10)

q1	-----	31.27	9.026	3.761	1.638	0.5723	9.709	3.732	1.506	0.4633	3.730	1.259
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	5p(5)	3d(10)	4d(10)
0.2	0.0521	0.108(-4)	0.109(-3)	0.524(-3)	0.00215	0.0115	0.146(-3)	0.834(-3)	0.00403	0.0249	0.00103	0.00682
0.4	0.211	0.432(-4)	0.438(-3)	0.00209	0.00864	0.0472	0.586(-3)	0.00334	0.0161	0.102	0.00411	0.0273
0.6	0.483	0.972(-4)	0.985(-3)	0.00471	0.0194	0.109	0.00132	0.00749	0.0363	0.233	0.00923	0.0614
0.8	0.868	0.173(-3)	0.00175	0.00836	0.0345	0.197	0.00234	0.0133	0.0644	0.421	0.0164	0.109
1.0	1.350	0.270(-3)	0.00273	0.0131	0.0538	0.305	0.00366	0.0208	0.100	0.655	0.0256	0.170
1.2	1.883	0.389(-3)	0.00393	0.0188	0.0772	0.414	0.00527	0.0299	0.144	0.909	0.0369	0.244
1.4	2.403	0.530(-3)	0.00535	0.0255	0.105	0.502	0.00717	0.0407	0.195	1.141	0.0501	0.331
1.6	2.857	0.692(-3)	0.00698	0.0332	0.136	0.557	0.00935	0.0530	0.254	1.313	0.0654	0.429
1.8	3.244	0.876(-3)	0.00883	0.0418	0.170	0.585	0.0118	0.0670	0.319	1.418	0.0826	0.540
2.0	3.570	0.00108	0.0109	0.0514	0.207	0.589	0.0146	0.0825	0.391	1.460	0.102	0.661
2.2	3.931	0.00131	0.0132	0.0619	0.245	0.607	0.0177	0.0995	0.468	1.503	0.123	0.791
2.4	4.241	0.00157	0.0157	0.0734	0.285	0.599	0.0210	0.118	0.550	1.500	0.146	0.930
2.6	4.553	0.00183	0.0183	0.0856	0.325	0.592	0.0247	0.138	0.636	1.484	0.171	1.075
2.8	4.878	0.00212	0.0212	0.0987	0.365	0.585	0.0286	0.160	0.726	1.469	0.198	1.226
3.0	5.212	0.00243	0.0243	0.113	0.402	0.579	0.0328	0.183	0.817	1.455	0.226	1.379
3.2	5.552	0.00276	0.0276	0.127	0.437	0.574	0.0372	0.207	0.908	1.442	0.256	1.533
3.4	5.892	0.00312	0.0311	0.142	0.468	0.569	0.0420	0.232	0.999	1.431	0.288	1.685
3.6	6.228	0.00349	0.0348	0.158	0.495	0.565	0.0470	0.259	1.088	1.421	0.322	1.834
3.8	6.557	0.00389	0.0387	0.174	0.518	0.562	0.0524	0.287	1.173	1.412	0.358	1.977
4.0	6.874	0.00431	0.0428	0.191	0.538	0.559	0.0580	0.317	1.254	1.404	0.395	2.112
5	8.221	0.00672	0.0659	0.280	0.581	0.547	0.0899	0.478	1.568	1.375	0.601	2.629
6	9.158	0.00967	0.0933	0.367	0.595	0.540	0.128	0.659	1.711	1.356	0.838	2.859
7	9.912	0.0131	0.124	0.444	0.585	0.536	0.173	0.849	1.780	1.344	1.096	2.968
8	10.45	0.0171	0.158	0.504	0.575	0.533	0.223	1.036	1.766	1.338	1.364	2.941
9	10.96	0.0216	0.195	0.545	0.567	0.530	0.279	1.209	1.745	1.329	1.630	2.905
10	11.42	0.0265	0.232	0.572	0.561	0.528	0.339	1.361	1.724	1.323	1.884	2.872
12	12.21	0.0379	0.309	0.584	0.551	0.526	0.472	1.586	1.691	1.318	2.319	2.816
14	12.78	0.0511	0.381	0.580	0.545	0.524	0.615	1.700	1.666	1.313	2.627	2.775
16	13.15	0.0659	0.444	0.573	0.540	0.524	0.765	1.734	1.648	1.312	2.798	2.745
18	13.39	0.0823	0.494	0.567	0.537	0.523	0.914	1.737	1.634	1.309	2.868	2.722
20	13.56	0.100	0.530	0.562	0.534	0.522	1.057	1.729	1.623	1.307	2.887	2.704

Xe 1s(2)2s(2)3s(2)4s(2)5s(2)2p(6)3p(6)4p(6)5p(6)3d(10)4d(10)

q1	-----	31.82	9.215	3.844	1.691	0.6078	9.916	3.824	1.577	0.4974	3.836	1.328
v	total	1s(2)	2s(2)	3s(2)	4s(2)	5s(2)	2p(6)	3p(6)	4p(6)	5p(6)	3d(10)	4d(10)
0.2	0.0494	0.104(-4)	0.105(-3)	0.504(-3)	0.00204	0.0105	0.141(-3)	0.799(-3)	0.00373	0.0244	0.976(-3)	0.00623
0.4	0.200	0.418(-4)	0.422(-3)	0.00201	0.00818	0.0429	0.563(-3)	0.00319	0.0149	0.0987	0.00390	0.0249
0.6	0.455	0.941(-4)	0.949(-3)	0.00453	0.0184	0.0987	0.00127	0.00718	0.0336	0.226	0.00877	0.0561
0.8	0.816	0.167(-3)	0.00169	0.00804	0.0327	0.178	0.00225	0.0128	0.0596	0.406	0.0156	0.0995
1.0	1.273	0.262(-3)	0.00263	0.0126	0.0510	0.277	0.00352	0.0199	0.0929	0.634	0.0243	0.155
1.2	1.797	0.377(-3)	0.00379	0.0180	0.0732	0.382	0.00507	0.0287	0.133	0.895	0.0350	0.223
1.4	2.340	0.513(-3)	0.00515	0.0245	0.0991	0.474	0.00689	0.0390	0.181	1.161	0.0476	0.302
1.6	2.850	0.669(-3)	0.00673	0.0319	0.129	0.538	0.00900	0.0508	0.235	1.396	0.0621	0.393
1.8	3.301	0.847(-3)	0.00851	0.0402	0.161	0.576	0.0114	0.0641	0.295	1.572	0.0785	0.494
2.0	3.687	0.00105	0.0105	0.0495	0.196	0.586	0.0140	0.0790	0.362	1.687	0.0968	0.605
2.2	4.039	0.00127	0.0126	0.0596	0.233	0.605	0.0170	0.0953	0.434	1.739	0.117	0.725
2.4	4.386	0.00151	0.0151	0.0706	0.272	0.600	0.0202	0.113	0.511	1.792	0.139	0.856
2.6	4.696	0.00177	0.0177	0.0824	0.311	0.593	0.0237	0.132	0.591	1.793	0.162	0.988
2.8	5.003	0.00205	0.0205	0.0951	0.349	0.586	0.0275	0.153	0.675	1.779	0.188	1.128
3.0	5.320	0.00235	0.0234	0.108	0.386	0.581	0.0315	0.175	0.762	1.764	0.215	1.272
3.2	5.643	0.00267	0.0266	0.122	0.421	0.576	0.0358	0.198	0.849	1.749	0.244	1.418
3.4	5.968	0.00302	0.0300	0.137	0.453	0.571	0.0404	0.223	0.936	1.736	0.275	1.564
3.6	6.293	0.00338	0.0336	0.152	0.481	0.567	0.0453	0.249	1.023	1.724	0.307	1.708
3.8	6.613	0.00377	0.0373	0.168	0.506	0.564	0.0504	0.276	1.107	1.712	0.340	1.849
4.0	6.926	0.00417	0.0412	0.185	0.527	0.560	0.0558	0.304	1.188	1.702	0.376	1.984
5	8.296	0.00651	0.0636	0.271	0.578	0.549	0.0865	0.460	1.516	1.664	0.573	2.529
6	9.292	0.00936	0.0900	0.357	0.596	0.542	0.124	0.645	1.687	1.639	0.800	2.813
7	10.08	0.0127	0.120	0.434	0.586	0.537	0.167	0.819	1.774	1.622	1.049	2.957
8	10.64	0.0166	0.153	0.495	0.577	0.537	0.215	1.003	1.770	1.610	1.308	2.950
9	11.13	0.0209	0.188	0.539	0.569	0.531	0.269	1.175	1.751	1.602	1.569	2.918
10	11.60	0.0257	0.225	0.568	0.562	0.529	0.327	1.329	1.731	1.595	1.820	2.885
12	12.39	0.0367	0.300	0.583	0.553	0.527	0.455	1.561	1.698	1.587	2.258	2.829
14	12.97	0.0495	0.372	0.580	0.546	0.525	0.595	1.688	1.672	1.580	2.580	2.787
16	13.37	0.0639	0.435	0.574	0.541	0.524	0.741	1.730	1.653	1.575	2.771	2.755
18	13.62	0.0798	0.486	0.568	0.538	0.523	0.887	1.737	1.639	1.575	2.855	2.731
20	13.80	0.0971	0.524	0.563	0.535	0.523	1.029	1.731	1.627	1.571	2.883	2.712