CP2K code changes

Major:

- 1. New keywords (float) for number of electrons NELEC ALPHA, NELEC BETA
- 2. New keyword (float) EPS_SCF_ARRAY to decrease EPS_SCF through OUTER_SCF

-•

Minor:

- 1. New keyword (logical) MUST CONVERGE aborts CP2K if inner SCF does not converge
- New keyword (float) EPS_SCF_MULTIPLIER as an alternative to EPS_SCF_ARRAY
- 3. New keywords (integer) MAGNETIZATION_N and MAGNETIZATION_L
- 4. &BS section NEL integer is now a float

Bug fixes:

- 1. OUTER_SCF now works for BROYDEN_MIXING (buffer reset each OUTER_SCF)
- 2. OUTER_SCF now works for DIRECT_P_MIXING (RMS gradient is now calculated correctly)

CHARGE 0 NELEC_ALPHA 316.8

NELEC_BETA 259.2

MUST_CONVERGE TRUE EPS_SCF 5E-3 EPS_SCF_ARRAY 5E-3 5E-4

```
&KIND Ni
BASIS_SET DZVP-MOLOPT-SR-GTH
POTENTIAL GTH-PBE-q18
MAGNETIZATION 2.0
MAGNETIZATION_N 3
MAGNETIZATION_L 2
&END KIND
```

Decreasing EPS_SCF through OUTER_SCF

EPS_SCF_ARRAY is used to specify EPS_SCF for each OUTER_SCF

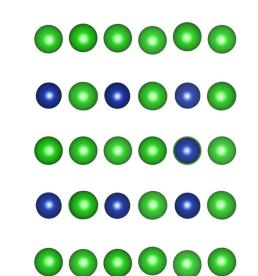
&OUTER_SCF MAX_SCF 12 EPS_SCF_5E-6

&SCF

	4
eps_scf: eps_scf_history: eps_diis: eps_eigval:	5.00E-03 0.00E+00 1.00E-01 1.00E-05
level_shift [a.u.]: added MOs eps_scf_array(1) eps_scf_array(2) eps_scf_array(3) eps_scf_array(4) eps_scf_array(5) eps_scf_array(6) eps_scf_array(7) eps_scf_array(8) eps_scf_array(9) eps_scf_array(10) eps_scf_array(11) eps_scf_array(12)	0.000000 100 100 5.00E-03 5.00E-04 4.00E-04 3.00E-04 2.00E-04 1.00E-05 4.00E-05 3.00E-05 2.00E-05 5.00E-06
Mixing method: charge density m	BROYDEN_MIXING ixing in g-space
Smear method: Electronic temperature [K]: Electronic temperature [a.u.]: Accuracy threshold:	FERMI_DIRAC 2000.0 6.33E-03 1.00E-10
Outer loop SCF in use No variables optimised in outer loop eps_scf max_scf	5.00E-06 12
-	eps_scf_history: eps_diis: eps_eigval: level_shift [a.u.]: added MOs eps_scf_array(1) eps_scf_array(2) eps_scf_array(3) eps_scf_array(5) eps_scf_array(6) eps_scf_array(7) eps_scf_array(8) eps_scf_array(9) eps_scf_array(10) eps_scf_array(11) eps_scf_array(12) Mixing method: Charge density m: Smear method: Electronic temperature [K]: Electronic temperature [a.u.]: Accuracy threshold: Outer loop SCF in use No variables optimised in outer loop eps_scf

Pt₃Ni(111) Yike structure ENERGY

- /rds/general/user/cahart/projects/archive/live/CX1/YIKE/ORR/water/Pt3Ni/water_bilayer
- Pt-segregated Pt₃Ni(111) structure with 45 Pt atoms, 15 Ni atoms (water removed)
- ~ 20A total vacuum (cell size: 9.378 0.0 0.0, -4.689 8.122 0.0, 0.0 0.0 29.0618991852)



Folder	Kpoints	Multiplicity	Energy / Ha	IASD	EPS_SCF	SCF steps	SCF loops *
(1)	1x1x1	(0*15)+1=1	-7948.9024	0.00	5e-6	44	1
(2)	1x1x1	(2*15)+1=31	-7948.9273	22.4	1e-2 -> 5e-6	176	16
(3)	8x8x1	(1*15)+1=16	-7949.3226	19.8	5e-3 -> 5e-6	130	12
(4)	8x8x1	(1*15)+1=16	-7949.3226	19.8	5e-3 -> 5e-6	128	8

^{*} Equal to 1 for no OUTER_SCF, else equal to len(EPS_SCF_ARRAY)

 $^{(1)\} Gitlab\ pt 3ni/slab_yike/scarf/convergence/testing/Ni-0_Pt-0_yike_4e-2_4e-3_16_100_2000_1-1-1_pbe-d3_dzvp_eps-5e-6$

⁽²⁾ Gitlab pt3ni/slab_yike/scarf/convergence/testing/Ni-2_Pt-0_yike_4e-2_4e-3_16_100_2000_1-1-1_pbe-d3_dzvp_eps-1e-2-5e-6-16

⁽³⁾ Gitlab pt3ni/slab_yike/scarf/convergence/outer_scf/eps_scf_array/Ni-1_Pt-0_yike_4e-2_4e-3_16_100_2000_8-8-1_pbe-d3_tzvp/MUST_CONVERGE_eps-5E-3_1E-3_5E-4_3E-4_2E-4_1E-4_5E-5_4E-5_3E-5_2E-5_1E-5_5E-6 (4) Gitlab pt3ni/slab yike/scarf/convergence/outer scf/eps scf_array/Ni-1 Pt-0 yike 4e-2 4e-3 16 100 2000 8-8-1 pbe-d3 tzvp/MUST CONVERGE eps-5E-3 5E-4 4E-4 3E-4 2E-4 1E-4 5E-5 5E-6

Pt₃Ni(111) Yike structure GEO_OPT

- Geometry optimisation can be run using OUTER_SCF and EPS_ARRAY
- SCF_GUESS ATOMIC
- 12 SCF loops is more reliable than 8 and adds negligible additional SCF steps

00000

Step	Energy / Ha	IASD	EPS_SCF	SCF steps	SCF loops *
0	-7949.3226	19.8	5e-3 -> 5e-6	134	12
1	-7949.3287	20.04	5e-3 -> 5e-6	105	12
2	-7949.3301	20.07	5e-3 -> 5e-6	95	12
3	-7949.3303	20.08	5e-3 -> 5e-6	87	12
10	-7949.3306	20.14	5e-3 -> 5e-6	71	12

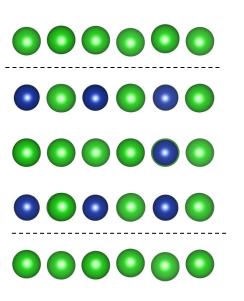
^{*} Equal to 1 for no OUTER_SCF, else equal to len(EPS_SCF_ARRAY)

(1) Gitlab pt3ni/slab_yike/scarf/geo_opt/guess/Ni-1_Pt-0_yike_4e-2_4e-3_16_100_2000_8-8-1_pbe-d3_tzvp/MUST_CONVERGE_eps-5E-3_5E-4_4E-4_3E-4_2E-4_1E-4_5E-5_4E-5_3E-5_2E-5_1E-5_5E-6

Pt₃Ni(111) Yike structure GEO_OPT constrained

- Geometry optimisation can be run using OUTER_SCF and EPS_ARRAY
- SCF_GUESS RESTART
- GEO_OPT with geometry constraints (surface reconstruction only)

Step	Energy / Ha	IASD	EPS_SCF	SCF steps	SCF loops *
0	-7949.3226	19.8	(5e-3 -> 5e-6)	(128)	(8)
1	-7949.3260	19.8	5e-3 -> 5e-6	83	8
2	-7949.3263	19.8	5e-3 -> 5e-6	79	8
3	-7949.3263	19.8	5e-3 -> 5e-6	83	8
8	-7949.3263	19.9	5e-3 -> 5e-6	53	8



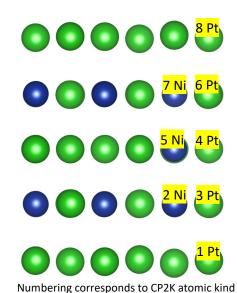
^{*} Equal to 1 for no OUTER_SCF, else equal to len(EPS_SCF_ARRAY)

(1) Gitlab pt3ni/slab_yike/scarf/geo_opt_constrained/restart/Ni-1_Pt-0_yike_4e-2_4e-3_16_100_2000_8-8-1_pbe-d3_tzvp/MUST_CONVERGE_eps-5E-3_5E-4_4E-4_3E-4_2E-4_1E-4_5E-5_5E-6

Supporting Information

Spin moments

Source	Bulk spin moment Ni, Pt
This work	0.61, 0.20
[1] VASP PBE	0.67, 0.16
[2] DFTB	0.65, 0.16
[3] DFTB	0.58, 0.10



#Atom Element Kind Ref Charge Population Spin moment Net charge 1				Hirshfeld	Charges			
2 Pt 1 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003 3 Pt 1 18.000 9.055 8.929 0.126 0.015 5 Pt 1 18.000 9.055 8.930 0.126 0.015 5 Pt 1 18.000 9.049 8.952 0.097 -8.001 6 Pt 1 18.000 9.048 8.958 0.078 0.007 7 Pt 1 18.000 9.048 8.956 0.080 0.010 9 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 10 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 11 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 11 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 11 Pt 1 18.000 9.059 8.920 0.135 0.019 11 Pt 1 18.000 9.059 8.920 0.139 0.022 12 Pt 1 18.000 9.059 8.920 0.139 0.022 13 Ni 2 18.000 9.059 8.920 0.139 0.022 13 Ni 2 18.000 9.059 8.00 0.010 16 Ni 2 18.000 9.059 8.00 0.010 16 Ni 2 18.000 9.051 8.675 0.818 -0.168 16 Ni 2 18.000 9.051 8.651 0.852 -0.154 17 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.185 0.192 18 Pt 3 18.000 9.041 8.856 0.186 0.183 19 Ni 2 18.000 9.041 8.856 0.186 0.183 20 Ni 2 18.000 9.041 8.856 0.186 0.183 21 Pt 3 18.000 9.041 8.856 0.186 0.183 22 Pt 3 18.000 9.041 8.856 0.186 0.183 23 Pt 3 18.000 9.041 8.856 0.186 0.183 24 Pt 3 18.000 9.041 8.856 0.186 0.183 25 Pt 4 18.000 9.050 8.654 0.186 0.183 26 Pt 4 18.000 9.050 8.654 0.186 0.183 27 Ni 5 18.000 9.041 8.856 0.186 0.183 28 Pt 4 18.000 9.050 8.856 0.214 0.154 29 Pt 4 18.000 9.050 8.856 0.214 0.154 20 Pt 4 18.000 9.050 8.856 0.214 0.114 21 Pt 3 18.000 9.050 8.856 0.214 0.114 24 Pt 3 18.000 9.050 8.856 0.215 0.186 0.181 27 Ni 5 18.000 9.050 8.856 0.216 0.186 0.181 28 Pt 4 18.000 9.050 8.856 0.216 0.186 0.181 30 Pt 4 18.000 9.050 8.856 0.216 0.186 0.181 31 Ni 5 18.000 9.050 8.856 0.216 0.186 0.181 32 Pt 4 18.000 9.050 8.856 0.216 0.186 0.181 34 Pt 6 18.000 9.050 8.856 0.216 0.186 0.193 35 Pt 6 18.000 9.050 8.856 0.216 0.186 0.193 36 Pt 6 18.000 9.050 8.856 0.216 0.186 0.193 37 Pt 6 18.000 9.050 8.856 0.216 0.195 38 Pt 6 18.000 9.050 8.856 0.216 0.195 39 Pt 8 18.000 9.050 8.855 0.216 0.195 30 Pt 8 18.000 9.050 8.855 0.216 0.195 30 Pt 8 18.000 9.050 8.855 0.081 0.093	#Atom	Element	Kind	Ref Charge	Popula			Net charge
3 Pt 1 18.000 9.055 8.920 0.126 0.015 4 Pt 1 18.000 9.055 8.930 0.126 0.015 5 Pt 1 18.000 9.049 8.952 0.097 -0.001 6 Pt 1 18.000 9.036 8.958 0.078 0.007 7 Pt 1 18.000 9.036 8.958 0.078 0.007 7 Pt 1 18.000 9.035 8.955 0.080 0.010 9 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.010 10 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 11 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 11 Pt 1 18.000 9.059 8.919 0.140 0.022 12 Pt 1 18.000 9.059 8.919 0.140 0.022 13 Ni 2 18.000 9.493 8.675 0.818 -0.168 14 Ni 2 18.000 9.493 8.678 0.813 -0.168 15 Ni 2 18.000 9.491 8.678 0.813 -0.168 16 Ni 2 18.000 9.041 8.857 0.185 0.192 18 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.185 0.192 19 Ni 2 18.000 9.041 8.857 0.186 0.192 19 Ni 2 18.000 9.041 8.857 0.186 0.192 20 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.192 21 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.192 22 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.192 24 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.192 25 Pt 4 18.000 9.041 8.857 0.186 0.192 26 Pt 4 18.000 9.041 8.857 0.186 0.192 27 Ni 5 18.000 9.041 8.857 0.186 0.192 28 Pt 4 18.000 9.041 8.857 0.186 0.194 29 Ni 2 18.000 9.041 8.857 0.186 0.194 24 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.194 25 Pt 4 18.000 9.041 8.855 0.186 0.194 26 Pt 4 18.000 9.041 8.854 0.187 0.185 27 Ni 5 18.000 9.041 8.855 0.186 0.194 28 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 27 Ni 5 18.000 9.041 8.854 0.187 0.186 0.194 28 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 29 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 20 Pt 6 18.000 9.041 8.854 0.187 0.195 31 Ni 5 18.000 9.041 8.854 0.187 0.186 0.194 40 Pt 6 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 27 Ni 5 18.000 9.060 8.836 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.060 8.836 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.060 8.836 0.215 0.114 31 Ni 6 18.000 9.060 8.836 0.215 0.114 31 Ni 7 18.000 9.060 8.836 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.060 8.836 0.215 0.139 0.021 31 Pt 6 18.000 9.060 8.060 8.060 0.109 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0	1	Pt		18.000	9.049	8.957	0.092	-0.007
4 Pt 1 18.000 9.055 8.930 0.126 0.015 6 Pt 1 18.000 9.040 8.952 0.097 -0.001 6 Pt 1 18.000 9.048 8.958 0.078 0.007 7 Pt 1 18.000 9.048 8.958 0.078 0.007 7 Pt 1 18.000 9.058 8.955 0.080 0.098 0.002 8 Pt 1 18.000 9.058 8.955 0.080 0.098 0.002 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1				18.000	9.036		0.075	0.003
5 Pt 1 18.000 9.049 8.952 0.097 -0.001 6 Pt 1 18.000 9.046 8.958 0.078 0.007 7 Pt 1 18.000 9.048 8.950 0.098 0.002 8 Pt 1 18.000 9.048 8.950 0.098 0.002 9 Pt 1 18.000 9.055 8.955 0.080 0.019 10 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 11 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 12 Pt 1 18.000 9.059 8.919 0.140 0.022 13 Ni 2 18.000 9.059 8.920 0.139 0.022 13 Ni 2 18.000 9.401 8.678 0.818 -0.168 14 Ni 2 18.000 9.491 8.678 0.813 -0.168 15 Ni 2 18.000 9.491 8.678 0.813 -0.168 16 Ni 2 18.000 9.491 8.678 0.813 -0.168 17 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.185 0.102 18 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.103 19 Ni 2 18.000 9.694 8.652 0.850 -0.154 20 Ni 2 18.000 9.694 8.652 0.850 -0.154 21 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.102 22 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.102 24 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.102 25 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.102 24 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.102 25 Pt 4 18.000 9.041 8.855 0.186 0.102 26 Pt 4 18.000 9.041 8.855 0.186 0.102 27 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.102 28 Pt 4 18.000 9.041 8.855 0.186 0.103 29 Ni 2 18.000 9.041 8.855 0.186 0.103 20 Ni 2 18.000 9.041 8.855 0.186 0.103 21 Ni 5 18.000 9.001 8.654 0.188 0.105 22 Pt 3 18.000 9.001 8.654 0.188 0.105 23 Pt 3 18.000 9.001 8.835 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.001 8.835 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.001 8.835 0.214 0.114 27 Ni 5 18.000 9.001 8.835 0.214 0.114 30 Pt 4 18.000 9.001 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.001 8.835 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.001 8.835 0.215 0.115 32 Pt 4 18.000 9.001 8.835 0.215 0.116 33 Ni 5 18.000 9.001 8.854 0.186 0.105 33 Ni 5 18.000 9.001 8.855 0.186 0.103 34 Pt 6 18.000 9.001 8.856 0.146 0.102 35 Pt 4 18.000 9.001 8.856 0.146 0.102 36 Pt 4 18.000 9.001 8.856 0.146 0.102 37 Pt 6 18.000 9.001 8.856 0.108 0.105 39 Pt 6 18.000 9.001 8.856 0.108 0.105 30 Pt 6 18.000 9.001 8.856 0.108 0.105 31 Ni 5 18.000 9.001 8.856 0.108 0.105 31 Ni 5 18.000 9.001 8.856 0.108 0.105 32 Pt 8 18.000 9.001 8.856 0.108 0.105 33 Ni 5 18.000 9.001 8.856 0.108 0.105 34 Pt 6 18.000 9.001 8.856 0.108 0.105 35 Pt 8 18.000 9.001 8.005 8.005 0.12								
6 Pt 1 18.000 9.036 8.958 0.078 0.007 7 Pt 1 18.000 9.048 8.959 0.089 0.002 8 Pt 1 18.000 9.048 8.955 0.080 0.010 9 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.017 11 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.017 11 Pt 1 18.000 9.059 8.919 0.140 0.022 12 Pt 1 18.000 9.059 8.920 0.139 0.022 13 Ni 2 18.000 9.493 8.675 0.818 0.019 14 Ni 2 18.000 9.491 8.678 0.813 0.016 15 Ni 2 18.000 9.491 8.678 0.813 0.016 16 Ni 2 18.000 9.699 8.051 0.852 0.015 17 Pt 3 18.000 9.691 8.651 0.852 0.015 18 Pt 3 18.000 9.641 8.857 0.185 0.102 19 Ni 2 18.000 9.641 8.857 0.186 0.103 19 Ni 2 18.000 9.641 8.857 0.186 0.103 19 Ni 2 18.000 9.641 8.857 0.186 0.103 20 Ni 2 18.000 9.641 8.857 0.186 0.103 21 Pt 3 18.000 9.641 8.857 0.186 0.103 22 Pt 3 18.000 9.641 8.857 0.186 0.103 23 Pt 3 18.000 9.641 8.857 0.186 0.103 24 Pt 3 18.000 9.641 8.857 0.186 0.103 25 Pt 4 18.000 9.041 8.857 0.186 0.103 26 Pt 4 18.000 9.061 8.857 0.186 0.104 27 Ni 5 18.000 9.641 8.857 0.186 0.104 28 Pt 4 18.000 9.650 8.654 0.846 0.103 29 Pt 4 18.000 9.061 8.857 0.186 0.104 20 Ni 2 18.000 9.061 8.857 0.186 0.104 21 Pt 3 18.000 9.061 8.857 0.186 0.104 22 Pt 3 18.000 9.061 8.857 0.186 0.104 23 Pt 3 18.000 9.061 8.857 0.186 0.104 24 Pt 3 18.000 9.061 8.855 0.186 0.104 25 Pt 4 18.000 9.050 8.336 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.050 8.336 0.214 0.114 27 Ni 5 18.000 9.050 8.335 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 32 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 33 Ni 5 18.000 9.061 8.855 0.186 0.104 34 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 35 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 37 Pt 6 18.000 9.061 8.857 0.184 0.102 38 Pt 6 18.000 9.061 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.061 8.855 0.186 0.188 0.105 30 Pt 8 18.000 9.061 8.855 0.186 0.104 31 Ni 5 18.000 9.060 8.836 0.215 0.115 32 Pt 8 18.000 9.060 8.835 0.215 0.115 33 Pt 8 18.000 9.060 8.835 0.215 0.115 34 Pt 6 18.000 9.060 8.836 0.215 0.116 35 Pt 8 18.000 9.060 8.060 8.060 0.104 0.103 37 Pt 6 18.000 9.060 8.060 8.060 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.060 8.060 8.060 0.104 0.10								
7 Pt 1 18.000 9.048 8.956 0.098 0.002 8 Pt 1 18.000 9.058 8.955 0.080 0.010 9 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 10 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 11 Pt 1 18.000 9.059 8.919 0.140 0.022 12 Pt 1 18.000 9.059 8.920 0.139 0.022 13 Ni 2 18.000 9.493 8.675 0.818 0.165 14 Ni 2 18.000 9.493 8.675 0.818 0.165 15 Ni 2 18.000 9.491 8.678 0.813 0.165 16 Ni 2 18.000 9.491 8.657 0.818 0.161 17 Pt 3 18.000 9.503 8.651 0.852 0.154 17 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.185 0.102 18 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.185 0.102 19 Ni 2 18.000 9.041 8.857 0.186 0.103 19 Ni 2 18.000 9.500 8.654 0.860 0.186 0.103 19 Ni 2 18.000 9.041 8.857 0.186 0.103 20 Ni 2 18.000 9.041 8.857 0.186 0.103 21 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.103 22 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.103 23 Pt 3 18.000 9.041 8.854 0.184 0.102 24 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.187 0.165 24 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.187 0.165 25 Pt 4 18.000 9.041 8.855 0.186 0.187 0.165 26 Pt 4 18.000 9.050 8.854 0.186 0.187 0.165 27 Ni 5 18.000 9.050 8.835 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.214 0.114 27 Ni 5 18.000 9.050 8.835 0.214 0.114 28 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.214 0.114 30 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.145 0.101 31 Ni 5 18.000 9.051 8.835 0.215 0.118 32 Pt 4 18.000 9.051 8.835 0.215 0.118 33 Ni 5 18.000 9.051 8.835 0.215 0.118 34 Pt 4 18.000 9.051 8.835 0.215 0.118 35 Pt 4 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 37 Pt 6 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 38 Pt 4 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 39 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.194 40 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.194 41 Ni 7 18.000 9.051 8.857 0.184 0.195 42 Pt 6 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 56 Pt 8 18.000 9.041 8.855 0.186 0.194 57 Pt 8 18.000 9.041 8.855 0.186 0.194 58 Pt 6 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 59 Pt 8 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.104 50 Pt 8 18.000 9.041 8.855 0.186 0.194 51 Pt 8 18.000 9.050 8.055 0.081 0.194 52 Pt 8 18.000 9.050 8.055 0.081 0.194 55 Pt 8 18.000 9.051 8.055 0.081 0.194 56 Pt 8 18.000 9.051 8.055 0.081 0.190 0.005 56 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.095 56 Pt 8 18.000 9.0								
8 Pt 1 18.000 9.035 8.953 0.185 0.010 9 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 10 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 11 Pt 1 18.000 9.059 8.919 0.140 0.022 12 Pt 1 18.000 9.059 8.920 0.139 0.022 13 Ni 2 18.000 9.473 8.675 0.818 0.163 14 Ni 2 18.000 9.491 8.676 0.818 0.163 15 Ni 2 18.000 9.491 8.676 0.818 0.163 15 Ni 2 18.000 9.489 8.680 0.809 0.6169 16 Ni 2 18.000 9.691 8.857 0.185 0.102 18 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.185 0.102 19 Ni 2 18.000 9.041 8.857 0.185 0.102 19 Ni 2 18.000 9.502 8.652 0.850 0.186 20 Ni 2 18.000 9.504 8.654 0.846 0.103 21 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.103 22 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.103 23 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.104 24 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.104 25 Pt 4 18.000 9.041 8.857 0.186 0.104 26 Pt 4 18.000 9.041 8.857 0.186 0.104 27 Ni 5 18.000 9.041 8.854 0.187 0.105 28 Pt 4 18.000 9.041 8.854 0.187 0.105 29 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.104 21 Pt 3 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 27 Ni 5 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 28 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 29 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 32 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 33 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 34 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 35 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.001 8.836 0.215 0.114 32 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 34 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 35 Pt 4 18.000 9.051 8.857 0.145 0.102 37 Pt 6 18.000 9.051 8.857 0.145 0.102 38 Pt 6 18.000 9.051 8.857 0.145 0.105 39 Pt 6 18.000 9.051 8.857 0.145 0.105 30 Pt 6 18.000 9.051 8.857 0.145 0.105 31 Ni 7 18.000 9.051 8.876 0.145 0.105 32 Pt 8 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 34 Pt 6 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 35 Pt 8 18.000 9.051 8.857 0.146 0.103 37 Pt 6 18.000 9.051 8.857 0.146 0.103 37 Pt 6 18.000 9.051 8.857 0.146 0.103 38 Pt 6 18.000 9.051 8.857 0.146 0.103 39 Pt 6 18.000 9.051 8.055 0.184 0.105 30 Pt 8 18.000 9.051 8.055 0.003 0.124 0.105 30 Pt 8 18.000 9.050 8.055 0.003 0.124 0.105 30 Pt 8								
9 Pt 1 18.000 9.058 8.923 0.135 0.019 10 Pt 1 18.000 9.059 8.929 0.135 0.019 11 Pt 1 18.000 9.059 8.919 0.140 0.022 12 Pt 1 18.000 9.059 8.920 0.139 0.022 13 Ni 2 18.000 9.493 8.675 0.818 -0.168 14 Ni 2 18.000 9.491 8.678 0.813 -0.168 15 Ni 2 18.000 9.493 8.675 0.818 -0.168 16 Ni 2 18.000 9.493 8.651 0.852 -0.154 17 Pt 3 18.000 9.651 8.857 0.185 0.102 18 Pt 3 18.000 9.641 8.856 0.186 0.103 19 Ni 2 18.000 9.641 8.856 0.186 0.103 19 Ni 2 18.000 9.502 8.652 0.850 -0.154 20 Ni 2 18.000 9.641 8.857 0.185 0.102 21 Pt 3 18.000 9.641 8.857 0.185 0.102 22 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.103 23 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.103 24 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 25 Pt 4 18.000 9.041 8.854 0.188 0.105 26 Pt 4 18.000 9.041 8.854 0.188 0.105 27 Ni 5 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 28 Pt 4 18.000 9.051 8.854 0.188 0.105 29 Pt 4 18.000 9.051 8.853 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.051 8.854 0.188 0.105 27 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.145 0.101 29 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.061 8.835 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.061 8.835 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.061 8.835 0.215 0.115 33 Ni 5 18.000 9.061 8.835 0.215 0.115 34 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 35 Pt 4 18.000 9.061 8.854 0.188 0.105 37 Pt 6 18.000 9.061 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 40 Pt 6 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 41 Ni 7 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 42 Pt 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 43 Ni 7 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 44 Pt 6 18.000 9.061 8.856 0.186 0.105 45 Pt 8 18.000 9.061 8.857 0.146 0.103 46 Pt 4 18.000 9.061 8.856 0.166 0.104 47 Ni 7 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 48 Ni 7 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 49 Pt 6 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 40 Pt 6 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 41 Ni 7 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 42 Pt 8 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 43 Ni 7 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 44 Pt 6 18.000 9.061 8.856 0.186 0.104 45 Ni 7 18.000 9.061 8.065 0.104 0.105 0.105 50 Pt 8 18.000 9.065 8.930 0.125 0.105 50 Pt 8 18								
10								
111 Pt 1 18.000 9.059 8.919 0.140 0.022 12 Pt 1 18.000 9.059 8.920 0.139 0.022 13 Ni 2 18.000 9.491 8.675 0.818 -0.168 14 Ni 2 18.000 9.491 8.676 0.813 -0.168 15 Ni 2 18.000 9.491 8.678 0.813 -0.168 16 Ni 2 18.000 9.593 8.651 0.852 -0.154 17 Pt 3 18.000 9.941 8.857 0.185 0.102 18 Pt 3 18.000 9.941 8.857 0.185 0.102 18 Pt 3 18.000 9.941 8.856 0.186 0.103 19 Ni 2 18.000 9.941 8.857 0.185 0.102 20 Ni 2 18.000 9.941 8.857 0.185 0.102 21 Pt 3 18.000 9.941 8.857 0.186 0.103 22 Pt 3 18.000 9.941 8.857 0.188 0.102 23 Pt 3 18.000 9.941 8.855 0.186 0.104 24 Pt 3 18.000 9.941 8.855 0.186 0.104 24 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 25 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.214 0.112 27 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 29 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 29 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.116 31 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 32 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.116 33 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 34 Pt 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 35 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 37 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 39 Pt 6 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 30 Pt 6 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 32 Pt 6 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 34 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 35 Pt 7 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 36 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 37 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 38 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 39 Pt 7 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 30 Pt 8 18.000 9.051 8.837 0.215 0.115 36 Pt 8 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 36 Pt 8 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 36 Pt 8 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 37 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 39 Pt 8 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 30 Pt 8 18.000 9.051 8.000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.								
12								
133 Ni 2 18.000 9.491 8.678 0.813 -0.168 114 Ni 2 18.000 9.497 8.678 0.813 -0.168 115 Ni 2 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.1.69 116 Ni 2 18.000 9.689 8.681 0.8852 -0.1.54 117 Pt 3 18.000 9.641 8.857 0.185 0.102 118 Pt 3 18.000 9.041 8.856 0.186 0.103 119 Ni 2 18.000 9.502 8.652 0.850 -0.154 120 Ni 2 18.000 9.601 8.654 0.846 0.103 121 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 122 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 123 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 124 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 125 Pt 4 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 126 Pt 4 18.000 9.050 8.636 0.214 0.114 127 Ni 5 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 130 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 129 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 131 Ni 5 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 132 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 133 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 134 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 135 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 136 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 137 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 138 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 139 Pt 6 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 140 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 156 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 157 Pt 6 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 158 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 158 Pt 6 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 159 Pt 8 18.000 9.057 8.050 0.139 0.021 150 Pt 8 18.000 9.051 8.057 0.186 0.104 150 Pt 6 18.000 9.051 8.055 0.186 0.104 157 Pt 6 18.000 9.051 8.055 0.186 0.104 157 Pt 6 18.000 9.051 8.055 0.186 0.104 157 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.105 159 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.105 150 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.005 150 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.005 150 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.005 150 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 150 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 150 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015								
14 Ni 2 18.000 9.491 8.678 0.813 -0.168 15 Ni 2 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.169 16 Ni 2 18.000 9.503 8.651 0.852 -0.154 17 Pt 3 18.000 9.641 8.857 0.185 0.102 18 Pt 3 18.000 9.641 8.857 0.185 0.103 19 Ni 2 18.000 9.502 8.652 0.850 -0.154 20 Ni 2 18.000 9.641 8.857 0.186 0.103 21 Pt 3 18.000 9.641 8.857 0.186 0.103 22 Pt 3 18.000 9.641 8.857 0.187 0.105 23 Pt 3 18.000 9.641 8.855 0.186 0.104 24 Pt 3 18.000 9.641 8.855 0.186 0.104 25 Pt 4 18.000 9.641 8.855 0.186 0.104 26 Pt 4 18.000 9.651 8.836 0.214 0.101 27 Ni 5 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 29 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 29 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.651 8.837 0.215 0.115 32 Pt 4 18.000 9.650 8.836 0.215 0.115 33 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 35 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 36 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 37 Ni 5 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 38 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 39 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 30 Pt 4 18.000 9.650 8.836 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 32 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 33 Ni 5 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 34 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 35 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 36 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 37 Ni 5 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 38 Pt 6 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 39 Pt 6 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 36 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.104 37 Pt 6 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 36 Pt 4 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 37 Pt 6 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 38 Pt 6 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 39 Pt 8 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 30 Pt 8 18.000 9.651 8.837 0.214 0.112 31 Ni 5 5 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8								
15 Ni 2 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.169 16 Ni 2 18.000 9.503 8.651 0.852 -0.154 17 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.185 0.102 18 Pt 3 18.000 9.041 8.856 0.186 0.103 19 Ni 2 18.000 9.500 8.652 0.850 -0.154 20 Ni 2 18.000 9.500 8.654 0.846 -0.154 21 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 22 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 23 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.106 23 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 24 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 25 Pt 4 18.000 9.050 8.336 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.050 8.336 0.214 0.114 27 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 29 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 29 Pt 4 18.000 9.050 8.335 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.335 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.050 8.335 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.050 8.336 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.050 8.336 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.050 8.335 0.215 0.115 34 Pt 4 18.000 9.050 8.335 0.215 0.115 35 Pt 4 18.000 9.050 8.336 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.050 8.336 0.215 0.115 34 Pt 4 18.000 9.050 8.336 0.215 0.115 35 Pt 4 18.000 9.050 8.355 0.215 0.115 36 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.146 0.103 37 Pt 6 18.000 9.051 8.857 0.184 0.102 41 Ni 7 18.000 9.050 8.355 0.186 0.104 40 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.146 0.103 41 Ni 7 18.000 9.050 8.355 0.186 0.104 42 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 43 Ni 7 18.000 9.041 8.856 0.186 0.104 44 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 50 Pt 8 18.000 9.050 8.050 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.055 8.090 0.125 0.105 50 Pt 8 18.000 9.055 8.090 0.125 0.105 50 Pt 8 18.000 9.055 8.090 0.125 0.105								
16 Ni 2 18.000 9.503 8.651 0.852 -0.154 17 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.185 0.102 18 Pt 3 18.000 9.041 8.856 0.186 0.103 19 Ni 2 18.000 9.502 8.652 0.850 -0.154 20 Ni 2 18.000 9.501 8.654 0.846 -0.154 21 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 22 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.103 23 Pt 3 18.000 9.041 8.856 0.186 0.104 24 Pt 3 18.000 9.041 8.856 0.186 0.104 25 Pt 4 18.000 9.041 8.856 0.186 0.105 25 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.022 8.877 0.145 0.101 27 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 29 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 31 Ni 5 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 32 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 33 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 34 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 35 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.102 33 Ni 5 18.000 9.041 8.851 0.620 -0.182 34 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 35 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.102 33 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.102 33 Ni 5 18.000 9.051 8.836 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.102 37 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.102 38 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.102 39 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.102 30 Pt 7 18.000 9.051 8.837 0.215 0.115 36 Pt 7 18.000 9.051 8.837 0.215 0.115 36 Pt 8 18.000 9.051 8.837 0.215 0.115 36 Pt 9 1 18.000 9.051 8.837 0.215 0.115 36 Pt 9 1 18.000 9.051 8.837 0.215 0.115 36 Pt 9 1 18.000 9.051 8.837 0.215 0.115 36 Pt 9 1 18.000 9.051 8.857 0.186 0.103 37 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.186 0.104 30 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.186 0.105 30 Pt 8 18.000 9.050 8.050 0.103 0.000 43 Ni 7 18.000 9.050 8.050 0.103 0.000 43 Ni 7 18.000 9.050 8.050 0.103 0.000 44 Pt 6 18.000 9.051 8.057 0.103 0.000 45 Pt 8 18.000 9.050 8.050 0.103 0.000 46 Pt 8 18.000 9.050 8.050 0.103 0.000 47 Ni 7 18.000 9.050 8.050 0.103 0.000 48 Ni 7 18.000 9.050 8.050 0.103 0.000 49 Pt 8 18.000 9.050 8.000 0.103 0.000 50 Pt 8 18.000 9.050 8.000 0.104 0.000 50 Pt 8 18.000 9.055 8.000 0.104 0.105 0.0000								
17 Pt 3 18.000 9.041 8.856 0.186 0.103 19 Ni 2 18.000 9.502 8.652 0.850 -0.154 20 Ni 2 18.000 9.500 8.654 0.846 -0.154 21 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 22 Pt 3 18.000 9.041 8.854 0.187 0.105 23 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.188 0.105 24 Pt 3 18.000 9.041 8.854 0.188 0.105 25 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 27 Ni 5 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 <t< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>								
19 Ni 2 18.000 9.502 8.652 0.850 -0.154 20 Ni 2 18.000 9.500 8.654 0.846 -0.1554 21 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 22 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 23 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 24 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 25 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.112 26 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.145 0.101 27 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 32 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 33 Ni 5 18.000 9.001 8.781 0.620 -0.182 33 Ni 5 18.000 9.001 8.781 0.620 -0.182 33 Ni 5 18.000 9.001 8.837 0.214 0.112 35 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.102 37 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.103 37 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 36 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 37 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 38 Pt 6 18.000 9.061 8.835 0.215 0.115 39 Pt 6 18.000 9.061 8.835 0.215 0.115 40 Pt 6 18.000 9.061 8.835 0.215 0.115 41 Ni 7 18.000 9.061 8.855 0.186 0.104 42 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.104 43 Ni 7 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.104 44 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.104 45 Ni 7 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.104 46 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.104 47 Ni 7 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.104 48 Ni 7 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.104 49 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.103 40 Pt 8 18.000 9.041 8.855 0.186 0.186 0.104 50 Pt 8 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 50 Pt 8 18.000 9.059 8.050 8.050 0.139 0.021 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 55 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.005 56 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.005 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.005	17	Pt	3	18.000	9.041	8.857	0.185	0.102
20 Ni 2 18.000 9.500 8.654 0.846 -0.154 21 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 22 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.186 0.105 23 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 24 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 25 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.022 8.877 0.145 0.101 27 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 29 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 32 Pt 4 18.000 9.051 8.781 0.662 -0.182 33 Ni 5 18.000 9.022 8.876 0.145 0.102 33 Ni 5 18.000 9.022 8.876 0.145 0.102 33 Ni 5 18.000 9.021 8.700 0.604 -0.183 34 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 35 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 36 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 37 Pt 6 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 38 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 39 Pt 6 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 41 Ni 7 18.000 9.051 8.856 0.146 0.103 37 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.146 40 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.146 41 Ni 7 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 42 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 43 Ni 7 18.000 9.041 8.856 0.186 0.104 44 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 9.041 8.856 0.186 0.104 46 Ni 7 18.000 9.050 8.654 0.847 -0.154 47 Ni 7 18.000 9.050 8.654 0.847 -0.154 48 Ni 7 18.000 9.051 8.652 0.851 -0.154 49 Pt 8 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 50 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.133 0.021 50 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 51 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 55 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.000 56 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.000 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.000	18	Pt	3	18.000	9.041	8.856	0.186	0.103
21 Pt 3 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 22 Pt 3 18.000 9.041 8.854 0.187 0.105 23 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 24 Pt 3 18.000 9.041 8.854 0.188 0.105 25 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.022 8.877 0.145 0.101 27 Ni 5 18.000 9.398 8.784 0.613 -0.182 28 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 29 Pt 4 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 32 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.116 31 Ni 5 18.000 9.050 8.836 0.215 0.116 32 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.000 8.836 0.215 0.114 32 Pt 4 18.000 9.000 8.836 0.215 0.115 33 Ni 5 18.000 9.000 8.836 0.215 0.115 34 Pt 4 18.000 9.000 8.836 0.215 0.102 33 Ni 5 18.000 9.000 8.836 0.215 0.102 33 Ni 5 18.000 9.000 8.836 0.215 0.102 33 Ni 5 18.000 9.000 8.836 0.215 0.102 33 Ni 7 18.000 9.000 8.835 0.214 0.102 34 Pt 4 18.000 9.000 8.835 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.000 8.835 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.000 8.835 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.000 8.835 0.215 0.116 37 Pt 6 18.000 9.001 8.856 0.146 0.103 37 Pt 6 18.000 9.001 8.856 0.146 0.103 39 Pt 6 18.000 9.001 8.855 0.186 0.104 40 Pt 6 18.000 9.001 8.855 0.186 0.104 41 Ni 7 18.000 9.001 8.856 0.186 0.104 42 Pt 6 18.000 9.001 8.856 0.186 0.104 43 Ni 7 18.000 9.001 8.652 0.849 -0.154 44 Pt 6 18.000 9.001 8.652 0.849 -0.154 45 Ni 7 18.000 9.001 8.652 0.849 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.001 8.652 0.849 -0.154 47 Ni 7 18.000 9.001 8.652 0.851 -0.154 48 Ni 7 18.000 9.001 8.652 0.851 -0.154 49 Pt 8 18.000 9.007 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.007 8.924 0.134 0.019 50 Pt 8 18.000 9.007 8.995 0.008 0.008 0.000 0.000 50 Pt 8 18.000 9.005 8.990 0.109 0.000 50 Pt 8 18.000 9.005 8.990 0.109 0.000 50 Pt 8 18.000 9.005 8.990 0.100 0.000 50 Pt 8 18.000 9.005 8.990 0.100 0.000	19	Ni		18.000	9.502	8.652	0.850	-0.154
22 Pt 3 18.000 9.041 8.854 0.187 0.105 23 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 24 Pt 3 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 25 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.101 27 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.145 0.101 28 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 29 Pt 4 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 31 Ni 5 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 32 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.115 33 Pt 4 18.000 9.051 8.781 0.620 -0.182 33 Pt 4 18.000 9.394 8.790 0.604 -0.183 34 Pt 4 18.000 9.394 8.790 0.604 -0.183 34 Pt 4 18.000 9.394 8.790 0.604 -0.183 35 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 36 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.051 8.857 0.145 0.102 37 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.146 0.103 38 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.146 0.103 39 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.104 40 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.104 41 Ni 7 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 41 Ni 7 18.000 9.041 8.856 0.186 0.104 42 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.104 43 Ni 7 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 44 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 46 Ni 7 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 47 Ni 7 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 48 Ni 7 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 49 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 50 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 55 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.005 56 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.005					9.500			
23 Pt								
24 Pt 3 18.000 9.041 8.854 0.188 0.195 25 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.214 0.114 26 Pt 4 18.000 9.052 8.877 0.145 0.101 27 Ni 5 18.000 9.398 8.784 0.613 -0.182 28 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.050 8.836 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.401 8.781 0.620 -0.182 32 Pt 4 18.000 9.021 8.876 0.145 0.102 33 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 35 Pt 4 18.000 <t< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>								
25								
26 Pt 4 18.000 9.022 8.877 0.145 0.101 27 Ni 5 18.000 9.398 8.784 0.613 -0.182 28 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.050 8.836 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.050 8.836 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.050 8.836 0.145 0.102 32 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 33 Ni 5 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 35 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 36 Pt 4 18.000 <td< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></td<>								
27 Ni 5 18.000 9.398 8.784 0.613 -0.182 28 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 29 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.401 8.781 0.620 -0.182 32 Pt 4 18.000 9.022 8.876 0.145 0.102 33 Ni 5 18.000 9.021 8.870 0.604 -0.183 34 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 35 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 36 Pt 4 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.051 8.876 0.146 0.103 37 Pt 6 18.000 9.041 8.854 0.188 0.105 38 Pt 6 18.000 9.041 8.854 0.188 0.105 39 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 40 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 41 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 42 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 43 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 44 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.103 43 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 44 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 47 Ni 7 18.000 9.503 8.652 0.851 -0.154 48 Ni 7 18.000 9.401 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 9.401 8.857 0.184 0.102 50 Pt 8 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 55 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 56 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015								
28								
29 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 30 Pt 4 18.000 9.050 8.836 0.215 0.114 31 Ni 5 18.000 9.401 8.781 0.620 -0.182 32 Pt 4 18.000 9.022 8.876 0.145 0.102 33 Ni 5 18.000 9.394 8.790 0.604 -0.183 34 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 35 Pt 4 18.000 9.051 8.835 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.061 8.835 0.215 0.116 37 Pt 6 18.000 9.041 8.854 0.188 0.105 39 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.105 40 Pt 6 18.000 <t< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>								
30								
31 Ni 5 18.000 9.401 8.781 0.620 -0.182 32 Pt 4 18.000 9.022 8.876 0.145 0.102 33 Ni 5 18.000 9.394 8.790 0.604 -0.183 34 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 35 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.021 8.876 0.146 0.103 37 Pt 6 18.000 9.041 8.854 0.188 0.105 38 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 41 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 42 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.103 43 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 44 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 9.500 8.654 0.847 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.503 8.652 0.851 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.418 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 9.418 8.652 0.851 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.418 8.677 0.184 0.102 47 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 54 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 55 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.005 56 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.005 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.005								
32 Pt								
34 Pt 4 18.000 9.051 8.837 0.214 0.112 35 Pt 4 18.000 9.050 8.835 0.215 0.115 36 Pt 4 18.000 9.021 8.876 0.146 0.103 37 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 40 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 41 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 42 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.103 43 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 42 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 <t< td=""><td>32</td><td>Pt</td><td>4</td><td>18.000</td><td>9.022</td><td>8.876</td><td>0.145</td><td>0.102</td></t<>	32	Pt	4	18.000	9.022	8.876	0.145	0.102
35 Pt	33	Ni	5	18.000	9.394	8.790	0.604	-0.183
36 Pt 4 18.000 9.021 8.876 0.146 0.103 37 Pt 6 18.000 9.041 8.854 0.188 0.105 38 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 40 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 41 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 42 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.103 43 Ni 7 18.000 9.503 8.654 0.847 -0.154 44 Pt 6 18.000 9.503 8.652 0.851 -0.154 45 Ni 7 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.168 47 Ni 7 18.000								
37 Pt 6 18.000 9.041 8.854 0.188 0.105 38 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 40 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 41 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 42 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.103 43 Ni 7 18.000 9.500 8.654 0.847 -0.154 44 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 9.500 8.652 0.851 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.503 8.652 0.851 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.168 47 Ni 7 18.000 9.493 8.675 0.818 -0.168 48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 54 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 55 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 55 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 55 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015								
38 Pt 6 18.000 9.041 8.855 0.186 0.104 39 Pt 6 18.000 9.041 8.854 0.187 0.105 40 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 41 Ni								
39 Pt 6 18.000 9.041 8.854 9.187 0.105 40 Pt 6 18.000 9.041 8.857 9.184 0.102 41 Ni								
40 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 41 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 42 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.183 43 Ni 7 18.000 9.500 8.654 0.847 -0.154 44 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 9.503 8.652 0.851 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.168 47 Ni 7 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.168 48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 54 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 55 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 55 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015								
41 Ni 7 18.000 9.501 8.652 0.849 -0.154 42 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.103 43 Ni 7 18.000 9.500 8.654 0.847 -0.154 44 Pt 6 18.000 9.503 8.652 0.851 -0.154 45 Ni 7 18.000 9.503 8.652 0.851 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.168 47 Ni 7 18.000 9.493 8.675 0.818 -0.168 48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 54 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 55 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 55 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015								
42 Pt 6 18.000 9.041 8.856 0.186 0.103 43 Ni 7 18.000 9.500 8.654 0.847 -0.154 44 Pt 6 18.000 9.641 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 9.503 8.652 0.851 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.168 47 Ni 7 18.000 9.491 8.675 0.818 -0.168 48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.659 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000								
43 Ni 7 18.000 9.500 8.654 0.847 -0.154 44 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 9.503 8.652 0.8551 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.168 47 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 54 Pt 8 18.000 9.058 8.955 0.081 0.010 55 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 56 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 57 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 58 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 59 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015								
44 Pt 6 18.000 9.041 8.857 0.184 0.102 45 Ni 7 18.000 9.503 8.652 0.851 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.168 47 Ni 7 18.000 9.493 8.675 0.818 -0.168 48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.139 0.021 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000								
45 Ni 7 18.000 9.503 8.652 0.851 -0.154 46 Ni 7 18.000 9.489 8.680 0.809 -0.168 47 Ni 7 18.000 9.493 8.675 0.818 -0.168 48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 54 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.002 55 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015								
47 Ni 7 18.000 9.493 8.675 0.818 -0.168 48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.659 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 54 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 55 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 55 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.036 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015								
48 Ni 7 18.000 9.491 8.677 0.813 -0.168 49 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 54 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 55 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 55 Pt 8 18.000 9.049 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 59 Pt 8 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003	46	Ni	7	18.000	9.489	8.680	0.809	-0.168
49 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 50 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 55 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 59 Pt 8 18.000 <td< td=""><td>47</td><td>Ni</td><td>7</td><td>18.000</td><td>9.493</td><td>8.675</td><td>0.818</td><td>-0.168</td></td<>	47	Ni	7	18.000	9.493	8.675	0.818	-0.168
50 Pt 8 18.000 9.059 8.920 0.139 0.021 51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 55 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 59 Pt 8 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003				18.000	9.491		0.813	
51 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 55 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 59 Pt 8 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003								
52 Pt 8 18.000 9.057 8.924 0.134 0.019 53 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 55 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 59 Pt 8 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003								
53 Pt 8 18.000 9.036 8.955 0.081 0.010 54 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 55 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 59 Pt 8 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003								
54 Pt 8 18.000 9.049 8.949 0.100 0.002 55 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 59 Pt 8 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003								
55 Pt 8 18.000 9.036 8.957 0.079 0.007 56 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 59 Pt 8 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003								
56 Pt 8 18.000 9.049 8.951 0.098 -0.001 57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 59 Pt 8 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003								
57 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.125 0.015 58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 59 Pt 8 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003								
58 Pt 8 18.000 9.055 8.930 0.124 0.015 59 Pt 8 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003								
59 Pt 8 18.000 9.036 8.961 0.075 0.003								
60 Pt 8 18.000 9.049 8.957 0.093 -0.006	59	Pt		18.000		8.961	0.075	
	60	Pt	8	18.000	9.049	8.957	0.093	-0.006

^[1] Sharma, B. K., Kwon, O., Odkhuu, D. & Hong, S. C.. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 339, 89–93 (2013).

^[2] Paudyal, D., Saha-Dasgupta, T. & Mookerjee, A. J. Phys.: Condens. Matter 16, 2317–2334 (2004).

^[3] Singh, P. P. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 261, 347–352 (2003).

Spin moments

Hirshfeld Charges

Population

Spin moment Net charge

0.114

-0.182

0.112

0.115

0.114

0.102

0.112

0.115

0.103

-0.182

-0.183

0.214

0.145

0.214

0.215

0.215

0.620

0.145

0.604

0.214

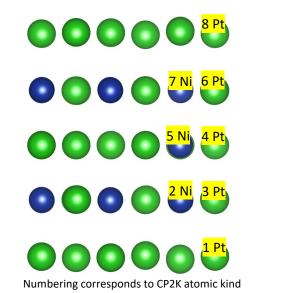
0.215

0.146

Source	Bulk spin moment Ni, Pt
This work	0.61, 0.20
[1] VASP PBE	0.67, 0.16
[2] DFTB	0.65, 0.16
[3] DFTB	0.58, 0.10

			_		•
25	Pt	4	18.000	9.050	8.836
26	Pt	4	18.000	9.022	8.877
27	Ni	5	18.000	9.398	8.784
28	Pt	4	18.000	9.051	8.837
29	Pt	4	18.000	9.050	8.835
30	Pt	4	18.000	9.050	8.836
31	Ni	5	18.000	9.401	8.781
32	Pt	4	18.000	9.022	8.876
33	Ni	5	18.000	9.394	8.790
34	Pt	4	18.000	9.051	8.837
35	Pt	4	18.000	9.050	8.835
36	Pt	4	18.000	9.021	8.876

#Atom Element Kind Ref Charge



^[1] Sharma, B. K., Kwon, O., Odkhuu, D. & Hong, S. C.. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 339, 89–93 (2013).

^[2] Paudyal, D., Saha-Dasgupta, T. & Mookerjee, A. J. Phys.: Condens. Matter 16, 2317-2334 (2004).

^[3] Singh, P. P. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 261, 347-352 (2003).

Methodology

Initial settings:

Ni MAGNETIZATION (2.0), Pt MAGNETIZATION (0.0) from Hund's rule

PBE, DZVP-MOLOPT, 1x1x1, ADDED_MOS (100), ELECTRONIC_TEMPERATURE (2000), ALPHA (4e-2), CUTOFF (600)

- 1. Using multiple restarts/OUTER_SCF: initial validation of lower energy ferromagnetic structure
- 2. Using multiple restarts/OUTER_SCF: initial screening for all parameters
- 3. Using coarse EPS SCF 5e-4 and MAX SCF 300: perform convergence grid searches for all parameters

Optimised settings:

NI MAGNETIZATION (1.0), Pt MAGNETIZATION (0.0)

PBE, TZVP-MOLOPT, 8x8x1, ADDED_MOS (100), ELECTRONIC_TEMPERATURE (2000), ALPHA (4e-2), CUTOFF (500)