Cu OAO occupations Nup+Ndown Nup-Ndown 0.05 0.3 0.00 0.2 -0.05 -0.10 0.1 -0.15 -0.20 0.0 -0.25 -0.10.30 3px 3py 3pz 3dxy 3dxy 38 4s 3dyz 3dz^2 3dxz 38 4s Зрх 3py 3pz 3dz^2 3dxy