Cu IAO2 occupation diff:COL0-COL Nup+Ndown Nup-Ndown 0.25 0.2 0.20 0.1 0.15 0.10 0.0 0.05 -0.10.00 -0.2-0.053px 3py 3pz 3dxy 3dyz 3dz^2 3px 3py 3pz 3dxy 3dyz 38 4s 38 4s