Home Search Collections Journals About Contact us My IOPscience

Relativity-Induced Ordering and Phase Separation in Intermetallic Compounds

This content has been downloaded from IOPscience. Please scroll down to see the full text.

1993 Europhys. Lett. 21 221

(http://iopscience.iop.org/0295-5075/21/2/017)

View the table of contents for this issue, or go to the journal homepage for more

Download details:

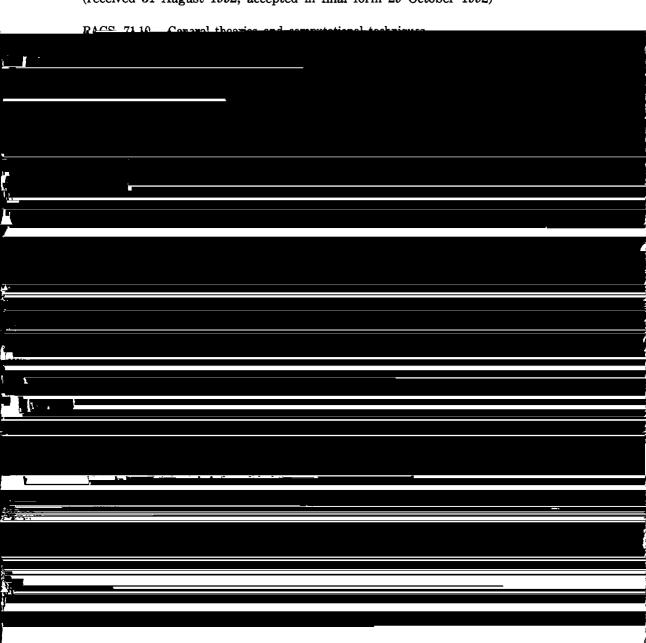
IP Address: 128.138.41.170

This content was downloaded on 14/07/2015 at 12:38

Please note that terms and conditions apply.

Relativity-Induced Ordering and Phase Separation in Intermetallic Compounds.

Z. W. Lu, S.-H. Wei and A. Zunger
 National Renewable Energy Laboratory - Golden, CO 80401, USA
 (received 31 August 1992; accepted in final form 29 October 1992)



First, deform hydrostatically pure A and B from their equilibrium volumes $V_{\rm A}$ and $V_{\rm B}$ to the volume. V skin to the first compound a with composition x. In doing so we invest a

	Z. W. Lu et a	$\it l$.: relativity	INDUCED ORDERIN	G AND PHAS	E SEPARATION E	CTC.	223
ı	Çi- <u>co-t</u> he-i		\ in a and [A <i>II</i> /-)) of forms	tion pyth <u>alvie</u> s	for and and arrange	n da
i I							
f							
	0						
= ;							
5							
Æ.							
<u>, </u>							
				<u> </u>			
<u> </u>							
Pri.							
·							

224 EUROPHYSICS LETTERS

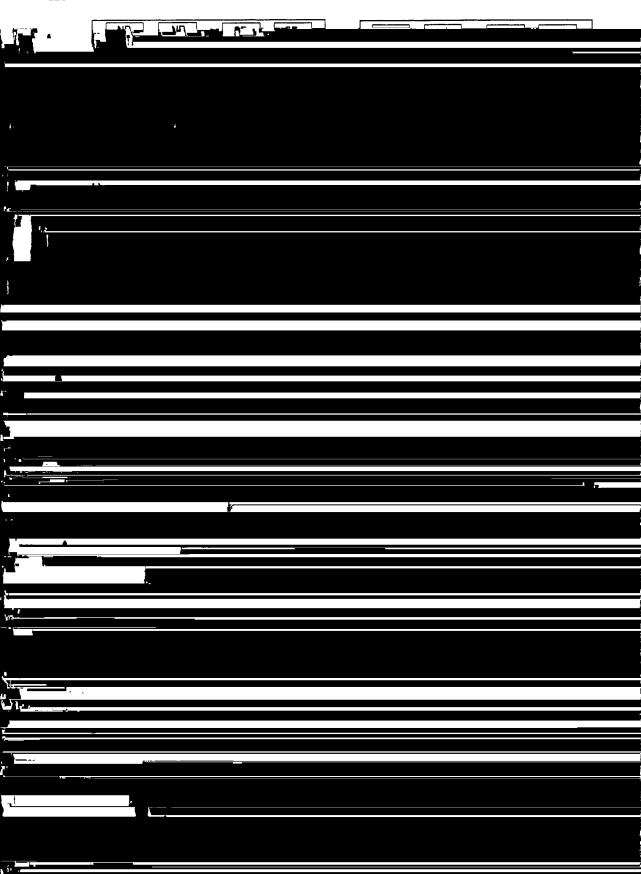


TABLE I. - Contributions of volume deformation (VD), charge exchange (CE), and relaxation (REL) to

$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Nonrelativistic Relativistic T Pandom						
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Nonrelativistic Relativistic T Pandom						
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Nonrelativistic Relativistic T Pandom						
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	7		÷-		
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					L.
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	-				,
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		Nonrelativistic		Relativistic	
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$			Vendom	<i>j</i> 1	Random
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		•			
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Ni Dt	. 1 1 1 1			
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	ΔE_{CE} -398.4 -307.0 -504.5 -403.3 ΔE_{REL} -51.6 -60.5 -18.0 -53.8 ΔH $+93.6$ $+176.1$ -95.7 -30.3 δE_{ord} -82.5 $ -65.4$ $ \Delta U_{0.5} \mathrm{Pt}_{0.5}$ $ -65.4$ $ \Delta E_{\mathrm{VD}}$ -82.5 $ -13.5$ -13.5 $+28.2$ $+1.5$ ΔE_{REL} -0 -0 -0 -0 ΔH -71.2 -61.2 $+76.8$ $+50.1$ δE_{ord} -10.0 $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$ $ -10.0$	Ni _{0.5} Pt _{0.5}	•			
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\Delta E_{ m REL}$ -51.6 -60.5 -18.0 -53.8 ΔH $+93.6$ $+176.1$ -95.7 -30.3 $\delta E_{ m ord}$ -82.5 $ -65.4$ $ Au_{0.5} Pt_{0.5}$ $\Delta E_{ m VD}$ $+42.3$ $+42.3$ $+48.6$ $+48.6$ $\Delta E_{ m CE}$ -113.5 -103.5 $+28.2$ $+1.5$ $\Delta E_{ m REL}$ ~ 0 ~ 0 ~ 0 ~ 0 ~ 0 ΔH -71.2 -61.2 $+76.8$ $+50.1$ $\delta E_{ m ord}$ -10.0 $ +26.7$ $ Ni_{0.5} Au_{0.5}$ $\Delta E_{ m VD}$ $+722.2$ $+722.2$ $+561.8$ $+561.8$ $\Delta E_{ m CE}$ -337.8 -283.8 -464.8 -369.2 $\Delta E_{ m REL}$ -11.9 -82.5 -20.2 -68.3 ΔH $+372.5$ $+355.9$ $+76.8$ $+124.3$	$\Delta E_{ m REL}$ -51.6 -60.5 -18.0 -53.8 ΔH $+93.6$ $+176.1$ -95.7 -30.3 $\delta E_{ m ord}$ -82.5 $ -65.4$ $ \Delta E_{ m VD}$ -82.5 $ -65.4$ $ \Delta E_{ m VD}$ -82.5 $ -103.5$ -103.5	$\Delta E_{ m VD}$				
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\Delta E_{ ext{VD}} \ \Delta E_{ ext{CE}}$	- 398.4	- 307.0	- 504.5	- 403.3
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\Delta E_{ ext{VD}} \ \Delta E_{ ext{CE}}$	- 398.4 - 51.6	- 307.0 - 60.5	- 504.5 - 18.0	- 403.3 - 53.8
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$egin{array}{l} \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \end{array}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6	- 307.0 - 60.5	- 504.5 - 18.0 - 95.7	- 403.3 - 53.8
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$egin{array}{l} \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \end{array}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6	- 307.0 - 60.5	- 504.5 - 18.0 - 95.7	- 403.3 - 53.8
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$egin{array}{l} \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \delta E_{ m ord} \end{array}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6	- 307.0 - 60.5	- 504.5 - 18.0 - 95.7	- 403.3 - 53.8
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\Delta E_{ m REL}$ ~ 0 ~ 0 ~ 0 ~ 0 ~ 0 ΔH -71.2 -61.2 $+76.8$ $+50.1$ $\Delta E_{ m ord}$ -10.0 $ +26.7$ $ -$	$egin{array}{l} \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \delta E_{ m ord} \ \hline ho_{0.5} { m Pt}_{0.5} \end{array}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5	- 307.0 - 60.5 + 176.1 -	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4	- 403.3 - 53.8 - 30.3
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$rac{\Delta E_{ ext{VD}}}{\Delta E_{ ext{CE}}} \ rac{\Delta E_{ ext{CE}}}{\Delta H} \ rac{\delta E_{ ext{ord}}}{\Delta L_{ ext{VD}}}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5	- 307.0 - 60.5 + 176.1 - + 42.3	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4 + 48.6	- 403.3 - 53.8 - 30.3
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$egin{array}{l} \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \delta E_{ m ord} \ \hline \Delta u_{0.5} { m Pt}_{0.5} \ \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \end{array}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5 + 42.3 - 113.5	- 307.0 - 60.5 + 176.1 - + 42.3 - 103.5	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4 + 48.6 + 28.2	- 403.3 - 53.8 - 30.3 + 48.6 + 1.5
$egin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$egin{array}{l} \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \delta E_{ m ord} \ \hline \Delta u_{0.5} { m Pt}_{0.5} \ \hline \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta E_{ m REL} \ \end{array}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5 + 42.3 - 113.5 ~ 0	- 307.0 - 60.5 + 176.1 + 42.3 - 103.5 ~ 0	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4 + 48.6 + 28.2 ~ 0	- 403.3 - 53.8 - 30.3
$\Delta E_{ m VD} & + 722.2 & + 722.2 & + 561.8 & + 561.8 \ \Delta E_{ m CE} & - 337.8 & - 283.8 & - 464.8 & - 369.2$	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$egin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$egin{array}{l} \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \delta E_{ m ord} \ \hline \Delta u_{0.5} { m Pt}_{0.5} \ \hline \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \end{array}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5 + 42.3 - 113.5 ~ 0 - 71.2	- 307.0 - 60.5 + 176.1 + 42.3 - 103.5 ~ 0	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4 + 48.6 + 28.2 ~ 0 + 76.8	- 403.3 - 53.8 - 30.3
$\Delta E_{ ext{CE}}^{ ilde{ ilde{ ilde{L}}}} = -337.8 \qquad -283.8 \qquad -464.8 \qquad -369.2$	$egin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\Delta E_{ m CE} = -337.8 $	$\Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \delta E_{ m ord} \ \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \delta E_{ m ord}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5 + 42.3 - 113.5 ~ 0 - 71.2	- 307.0 - 60.5 + 176.1 + 42.3 - 103.5 ~ 0	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4 + 48.6 + 28.2 ~ 0 + 76.8	- 403.3 - 53.8 - 30.3
$\Delta E_{ ext{CE}}^{ ilde{ ilde{ ilde{L}}}} = -337.8 \qquad -283.8 \qquad -464.8 \qquad -369.2$	$egin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\Delta E_{ m CE} = -337.8 $	$\Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \delta E_{ m ord} \ \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \delta E_{ m ord}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5 + 42.3 - 113.5 ~ 0 - 71.2	- 307.0 - 60.5 + 176.1 + 42.3 - 103.5 ~ 0	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4 + 48.6 + 28.2 ~ 0 + 76.8	- 403.3 - 53.8 - 30.3
	$\Delta E_{ m REL} = -11.9 - 82.5 - 20.2 - 68.3 \ \Delta H + 372.5 + 355.9 + 76.8 + 124.3$	$\Delta E_{ m REL} = -11.9 - 82.5 - 20.2 - 68.3 \ \Delta H + 372.5 + 355.9 + 76.8 + 124.3$	$\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m REL}$ ΔH $\delta E_{ m ord}$ $\Delta u_{0.5} { m Pt}_{0.5}$ $\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m REL}$ ΔH $\delta E_{ m ord}$ $Ni_{0.5} { m Au}_{0.5}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5 + 42.3 - 113.5 - 0 - 71.2 - 10.0	- 307.0 - 60.5 + 176.1 - + 42.3 - 103.5 ~ 0 - 61.2	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4 + 48.6 + 28.2 - 0 + 76.8 + 26.7	- 403.3 - 53.8 - 30.3
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	ΔH + 372.5 + 355.9 + 76.8 + 124.3	ΔH + 372.5 + 355.9 + 76.8 + 124.3	$\Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \delta E_{ m ord} \ \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m CE} \ \Delta E_{ m REL} \ \Delta H \ \delta E_{ m ord} \ Ni_{0.5} Au_{0.5} \ \Delta E_{ m VD} \ \Delta E_{ m Crd}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5 + 42.3 - 113.5 - 0 - 71.2 - 10.0	- 307.0 - 60.5 + 176.1 - + 42.3 - 103.5 ~ 0 - 61.2 - + 722.2	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4 + 48.6 + 28.2 ~ 0 + 76.8 + 26.7	- 403.3 - 53.8 - 30.3
ΔH + 372.5 + 355.9 + 76.8 + 124.3			$\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m REL}$ ΔH $\delta E_{ m ord}$ $\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m REL}$ ΔH $\delta E_{ m ord}$ $Ni_{0.5}Au_{0.5}$ $\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5 + 42.3 - 113.5 - 0 - 71.2 - 10.0 + 722.2 - 337.8 - 11.9	- 307.0 - 60.5 + 176.1 - + 42.3 - 103.5 ~ 0 - 61.2 - + 722.2 - 283.8	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4 + 48.6 + 28.2 ~ 0 + 76.8 + 26.7 + 561.8 - 464.8 - 20.2	- 403.3 - 53.8 - 30.3 + 48.6 + 1.5 - 0 + 50.1 + 561.8 - 369.2 - 68.3
	, , , ,		$\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m REL}$ ΔH $\delta E_{ m ord}$ $\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m REL}$ ΔH $\delta E_{ m ord}$ ΔH $\delta E_{ m ord}$ $\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m Ni}$ $\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m REL}$ ΔH	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5 + 42.3 - 113.5 ~ 0 - 71.2 - 10.0 + 722.2 - 337.8 - 11.9 + 372.5	- 307.0 - 60.5 + 176.1 - + 42.3 - 103.5 ~ 0 - 61.2 - + 722.2 - 283.8 - 82.5	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4 + 48.6 + 28.2 - 0 + 76.8 + 26.7 + 561.8 - 464.8 - 20.2 + 76.8	- 403.3 - 53.8 - 30.3 + 48.6 + 1.5 - 0 + 50.1 + 561.8 - 369.2 - 68.3
			$\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m REL}$ ΔH $\delta E_{ m ord}$ $\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m REL}$ ΔH $\delta E_{ m ord}$ ΔH $\delta E_{ m ord}$ $\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m Ni}$ $\Delta E_{ m VD}$ $\Delta E_{ m CE}$ $\Delta E_{ m REL}$ ΔH	- 398.4 - 51.6 + 93.6 - 82.5 + 42.3 - 113.5 ~ 0 - 71.2 - 10.0 + 722.2 - 337.8 - 11.9 + 372.5	- 307.0 - 60.5 + 176.1 - + 42.3 - 103.5 ~ 0 - 61.2 - + 722.2 - 283.8 - 82.5	- 504.5 - 18.0 - 95.7 - 65.4 + 48.6 + 28.2 - 0 + 76.8 + 26.7 + 561.8 - 464.8 - 20.2 + 76.8	- 403.3 - 53.8 - 30.3 + 48.6 + 1.5 - 0 + 50.1 + 561.8 - 369.2 - 68.3

