

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ

«На правах рукопису»
УДК 539.18:19, 544.2, 004.942

«До захисту допущено»
Завідувач кафедри
Геннадій МОНАСТИРСЬКИЙ
“ ___ ” _____ 2022 р.

МАГІСТЕРСЬКА ДИСЕРТАЦІЯ
на здобуття ступеня магістра

зі спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали
на тему: Дослідження властивостей активних діелектриків та їх модифікацій

Виконала: студентка 2 курсу, групи ФФ-01мн
(шифр групи)

	<u>Галкіна Ганна Костянтинівна</u> (прізвище, ім'я, по батькові)	_____
		(підпис)
Керівник	<u>доцент, к. т. н., доц., Наталія ГОРДІЙКО</u> (посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)	_____
		(підпис)
Консультант	<u>провідний інженер, Сергій МУРАВОВ</u> (назва розділу) (посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)	_____
		(підпис)
Рецензент	<u>к.ф.-м.н., доц. Володимир КОНДАКОВ</u> (посада, науковий ступінь, вчене звання, науковий ступінь, прізвище та ініціали)	_____
		(підпис)

Засвідчую, що у цій дипломній роботі немає запозичень з праць інших авторів без відповідних посилань.

Студент _____
(підпис)

Київ – 2022 рік

**Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»**

Інститут/факультет
(повна назва)

Навчально-науковий фізико – технічний інститут

Кафедра
(повна назва)

Прикладної фізики

Рівень вищої освіти – другий (магістрський)

Спеціальність (спеціалізація) 105 Прикладна фізика та наноматеріали
(код і назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри

_____ Геннадій МОНАСТИРСЬКИЙ
(підпис) (ініціали, прізвище)

« ___ » _____ 2022 р.

ЗАВДАННЯ

на магістерську дисертацію студенту

Галкіній Ганні Костянтинівні

1. Тема роботи: Дослідження властивостей активних діелектриків та їх модифікацій.

керівник роботи Гордійко Наталія Олександрівна, к. т. н., доцент

затверджені наказом по університету від «08» червня 2022 р. №976-С

2. Строк подання студентом проекту (роботи) 18 червня 2022 року

3. Вихідні дані до проекту (роботи) Літературні джерела по дослідженню ПВДФ, програмне забезпечення Gaussian09 _____

4. Зміст (магістерської дисертації) пояснювальної записки (перелік завдань, які потрібно розробити): Дослідження характеристик активних діелектриків та моделювання β -фази сегнетоелектрика ПВДФ для дослідження її конформацій.

5. Перелік графічного (ілюстративного) матеріалу (із зазначенням обов'язкових креслеників, плакатів, презентацій тощо) Презентація до дипломної роботи

6. Консультанти розділів проекту (роботи)*

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв

7. Дата видачі завдання 1 жовтня 2020 року

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації (роботи)	Строк виконання етапів проекту (роботи)	Примітка
1	Вивчення властивостей активних діелектриків	01.02.2021	виконано
2	Аналіз властивостей сегнетоелектриків, їх видів та застосування.	24.05.2021	виконано
3	Проведення дослідження властивостей конформацій ПВДФ	27.09.2021	виконано
4	Вивчення програмного забезпечення	20.12.2021	виконано
5	Моделювання β -форми ПВДФ	21.02.2022	виконано
6	Проведення розрахунків для змодельованого полімера	14.03.2022	виконано
7	Порівняння результатів між собою та з експериментальними результатами інших дослідників	16.05.2022	виконано
8	Оформлення виконаної роботи	16.06.2022	виконано

Студентка _____

Ганна ГАЛКІНА

Керівник проекту (роботи) _____

Наталія ГОРДІЙКО

РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація має обсяг 98 сторінок та містить 29 рисунків, 6 таблиць та 1 додаток, використано 27 бібліографічних джерел.

Робота присвячена дослідженню властивостей активного діелектрика на прикладі полівініліденфториду (ПВДФ) за допомогою методів реалізованих у квантово-хімічному програмному пакеті Gaussian.

Вибір ПВДФ спричинений вдалою комбінацією його властивостей (хімічна стійкість, висока механічна міцність, сегнетоелектричність, п'єзо- та піроелектричні властивості, нерозчинність, можливість перероблення). ПВДФ широко використовується у високотехнологічних галузях – виробництві електронних компонентів та електричних приладів, обладнання для хімічних процесів, в енергетиці тощо. Тому дослідження властивостей ПВДФ є актуальною та перспективною задачею.

Метою роботи є комп'ютерне моделювання полімерів та розрахунок їх характеристик.

До обраної β - фази (I форми) ПВДФ було застосовано методи для розрахунку реалізовані у програмному пакеті Gaussian. Отримані результати порівняно з результатами експериментальних досліджень закордонних авторів.

Прогнозні припущення: планується подальше дослідження інших (менш досліджених) форм ПВДФ з метою розширення області застосування матеріалу.

Ключові слова: активний діелектрик, сегнетоелектрик, полівініліденфторид, ПВДФ, конформація, методи розрахунку, Gaussian, GaussView.

ABSTRACT

The master's dissertation has a volume of 98 pages and contains 29 figures, 6 tables and 1 appendices, 27 bibliographic sources were used.

The work is devoted to the study of the properties of the active dielectric on the basis of polyvinylidene fluoride (PVDF) using methods implemented in the quantum chemical software package Gaussian.

The choice of PVDF is due to the successful combination of its properties (chemical resistance, high mechanical strength, ferroelectricity, piezoelectric and pyroelectric properties, insolubility, recyclability). PVDF is widely used in high-tech industries - the production of electronic components and electrical appliances, equipment for chemical processes, energy and more. Therefore, the study of the properties of PVDF is an urgent and promising task.

The aim of the work is computer modeling of polymers and calculation of their characteristics.

Methods for calculation implemented in the Gaussian software package were applied to the selected β - phase (I form) of PVDF. The results are compared with the results of experimental studies by foreign authors. The calculation method most suitable for this material is determined.

Predictive assumptions: further research of other (less studied) forms of PVDF is planned in order to expand the scope of the material.

Key words: active dielectric, ferroelectric, polyvinylidene fluoride, PVDF, conformation, calculation methods, Gaussian, GaussView.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ	7
ВСТУП.....	8
1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД ТА ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ДОСЛІДЖЕННЯ	10
1.1 Нелінійність сегнетоелектриків	22
1.2 Сегнетоелектричні плівки.....	23
1.3 Властивості ПВДФ	24
1.4 Конформації полівінілденфториду	27
Висновки до розділу 1	30
2. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПВДФ ТА РОЗРАХУНОК ХАРАКТЕРИСТИК.....	31
2.1 Структура ПВДФ	31
2.2 Побудова полімера	32
2.3 Методи дослідження	43
2.4 Розрахунки.....	48
Висновки до розділу 2	56
ВИСНОВКИ.....	57
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ	58
ДОДАТОК А.....	62

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І
ТЕРМІНІВ

Латинські символи:

P_c – спонтанна поляризація;

E – електричне поле;

E_k – коерцитивне поле;

T – температура;

T_k – температура Кюрі;

φ_i – канонічні молекулярні орбіталі;

$|\gamma|$ – пірокофіцієнт;

C – атом вуглецю (карбон);

F – атом фтору;

H – атом водню (гідроген);

Скорочення:

СУП – самоузгоджене поле;

LDA – наближення локальної щільності (Local density approximation);

EOM – електронна обчислювальна машина;

ТКО – температурний коефіцієнт опору;

ПВДФ – полівініліденфторид (polyvinylidene fluoride);

VDF – вініліденфторид;

TrFE – трифторетилен;

TeFE – тетрафторетилен;

IRC – внутрішня координата реакції;

DFT – метод функціоналу щільності;

TTTT (all-trans) – транс-транс-транс-транс конформація ПВДФ;

TGTG' – транс-гош-транс-гош' конформація ПВДФ;

T3GT3G' (all-trans) – 3-транс-гош-3-транс-гош' конформація ПВДФ.

ВСТУП

Останнім часом відзначається підвищений інтерес до активних діелектриків через знаходження для них нових застосувань у різних галузях. Через стрімкий розвиток мікроелектроніки зацікавленість спрямована в основному на сегнетоелектрики, піроелектрики та п'єзоелектрики.

Одним з найцікавіших матеріалів є полімер полівініліденфторид (ПВДФ). Він має таку комбінацію властивостей як сегнетоелектричність, п'єзо та піроелектричність, хімічна та механічна стійкість, тощо. Завдяки таким властивостям він знаходить своє застосування у багатьох галузях – у електронних компонентах та електричних приладах, обладнанні для хімічних процесів, в енергетиці тощо [1,2]. Таким чином дослідження властивостей ПВДФ є актуальною та перспективною задачею.

В даний момент дослідження речовин можуть проводитися за допомогою комп'ютерного моделювання структури цієї речовини. За допомогою квантово-хімічного пакету Gaussian та візуальної програми-додатка GaussView можливо змодельовати структуру речовини та дослідити її. Пакет Gaussian вважається одним з найкращих через його велику кількість вбудованих методів розрахунку та точність. Він дозволяє розв'язати широке коло задач з фізики, хімії, квантової механіки, біохімії тощо. В ньому реалізує багато методів для розрахунку структур і властивостей молекул різних речовин – їх енергії, перехідні стани, електронні, коливальні і раманівські спектри, поверхні потенціальної енергії, різноманітні властивості молекул в газовій фазі та розчині в основному і в збуджених станах та ін.

Метою роботи є комп'ютерне моделювання активних діелектриків та розрахунок їх характеристик.

Об'єктами дослідження є поліморфні форми ПВДФ, зокрема його I форма (β - фаза).

Предмет дослідження – властивості різних фаз ПВДФ, зокрема β -фази (I форми).

Методи дослідження – комп'ютерне моделювання та методи теорії функціонала щільності (DFT).

Основними завданнями роботи були дослідження можливостей квантово-хімічного пакету Gaussian щодо моделювання поліморфних форм ПВДФ та розрахунок характеристик, а саме: 1) моделювання β -фази ПВДФ засобами графічного інтерфейсу GaussView; 2) розрахунок повної енергії за допомогою методів, наданих пакетом Gaussian; 3) інтерпретація отриманих результатів.

Наукова новизна отриманих результатів полягає в застосуванні методів, реалізованих у пакеті Gaussian, для моделювання полімера та розрахунку його характеристик, з метою подальшого вивчення.

Практичне значення отриманих результатів полягає в експериментальному обґрунтуванні можливості ефективного використання пакету Gaussian для подальшого дослідження різних (в тому числі й сегнетоелектричних) матеріалів, з метою створення матеріалів із заданими фізико-хімічними властивостями.

Результати роботи було апробовано на XX Всеукраїнської науково-практичній онлайн-конференції студентів, аспірантів та молодих вчених "Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики" [3].

1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД ТА ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ДОСЛІДЖЕННЯ

До активних діелектриків останнім часом спостерігається підвищений інтерес, через їх широке застосування у сферах електроніки, електробудування, наноелектроніки та інших. Активними діелектриками називають матеріали які проявляють сегнетоелектричні, піроелектричні або п'єзоелектричні властивості.

В застосуванні активних діелектриків виокремлюються три основних напрямки:

- 1) Мікросистеми що включають в себе актуатори, процесори і сенсори;
- 2) Модулі високої частоти;
- 3) Сегнетоелектричні полімерні плівки що з'єднані з напівпровідниками.

Застосування сегнетоелектричних плівок стало поширеним з моменту коли вперше змогли з'єднати їх з напівпровідниковим процесором в одну структуру. Такі плівки можуть бути піроелектричними, п'єзоелектричними або сегнетоелектричними, і їх поєднання разом з напівпровідником відкриває нові можливості в їх застосуванні у сегнето-напівпровідникових інтегровананих пристроях. Це сучасний напрям у мікроелектроніці - система добре з'єднана та має високу щільність елементів, і при цьому вона є багатофункціональною. Зараз галузь використання таких систем розвивається, а інтегровані пристрої широко використовуються у комп'ютерній техніці.[4]

Основними елементами у мікросистемі є сенсори й актуатори. Вони на фізичному рівні використовують властивості напівпровідників та діелектриків. В мікроелектроніці зараз є спрямування до переходу від напівпровідникових сенсорів до тих які мають істотно менший фактор шуму – діелектричних. Окрім цього дуже важливим стає поєднання функцій сенсора та актуатора у одному робочому тілі через прагнення до оптимізації та зменшенні самих мікросхем. Саме такі властивості і мають активні діелектрики.

Сенсор (або датчик) – це чутливий елемент який певним чином реагує на зміну вимірюваної величини, після чого ця інформація реєструється і перетворюється в зручний для сприймання, запису, зберігання сигнал [5].

У напівпровідникових сенсорах для детектування температури або тиску використовується залежність зміни електричної провідності від цих параметрів. Але тут є недолік – шуми сенсора, які визначаються дробовим квантовим ефектом Холла (через те що носії зарядів – електрони, і в залежності поперечної магнітопровідності від дробових значень напруженості магнітного поля виникає плато). В свою чергу діелектричні сенсори майже не проводять струм, таким чином в них набагато нижчий шум ніж в напівпровідникових. Наприклад може використовуватись залежність спонтанної поляризації від температури у піроелектриках та сегнетоелектриках:

$$\delta P = \gamma \delta T ; \quad (1.1)$$

де: δP – зміна поляризації;

γ – піроелектричний коефіцієнт;

δT – зміна температури.

Також можливий варіант вимірювання таким чином зміни тиску чи механічного напруження через об'ємний п'єзоэффект (виникнення електричного заряду через деформацію матеріалу та навпаки):

$$\delta P = e \delta p ; \quad (1.2)$$

де: δP – зміна поляризації;

e – п'єзоелектричний коефіцієнт;

δT – зміна тиску;

або через прямий п'єзоэффект:

$$P = eX ; \quad (1.3)$$

де: P – поляризація;

e – п'єзоелектричний коефіцієнт;

X – механічне напруження.

Отже для того щоб підвищити чутливість сенсорів шляхом зменшення рівня шуму зараз використовуються широкозонні напівпровідники ($GaAs$ та GaN), а також дуже перспективні в цьому напрямку п'єзополімери, сегнетоелектричні та піроелектричні плівки, оскільки вони поєднують у собі властивості які потрібні і для сенсорів і для актуаторів.

П'єзоефект можливий у 20 класах кристалів і є загальною електричною властивістю всіх кристалів які мають не центральну симетрію (також називаються ацентричними). Половина з цих класів належить до «справжніх» п'єзоелектриків, в той час як інша половина відноситься до піроелектричної симетрії. Таким чином виходить що кожен піроелектрик має п'єзоефект, але не всі п'єзоелектрики мають піроефект[4,6].

В «справжніх» п'єзоелектриках, обмежених симетрією, неможлива напрямлена (векторна) реакція на жодний скалярний вплив, для механічно вільного кристалу. Без механічного напруження (обираючи ідеальні умови) в п'єзоелектрику змінення таких скалярних величин як гідростатичний тиск та температура не збуджують жодного п'єзоефекту або піроефекту. Вони можуть виникати тільки в кристалах з піроелектричною симетрією.

Але в «справжніх» піроелектриках електричну реакцію може спровокувати не скалярний вплив, або особливі граничні умови. Таким чином об'ємний п'єзоефект здійснюється у п'єзоелектричних матеріалах, а піроефект можна викликати шляхом неоднорідного підвищення температури в п'єзоелектрику.

На відміну від інших п'єзоелектриків, спонтанно поляризовані піроелектрики та сегнетоелектрики мають дипольну структуру (одновимірну упорядкованість). Отже на відміну від піроелектричного моменту який має тільки одну компоненту, п'єзоелектрична полярність подається у площинному або об'ємному (2D або 3D) вигляді.

Енергія електричного поля, яке створене одиночним електричним зарядом у просторі залежить як:

$$E \approx \frac{1}{r}; \quad (1.4)$$

де :

E – енергія електричного поля;

r – відстань від вимірюваної точки до заряду.

Таким чином видно що тоді спонтанна поляризація для 2D та 3D моделей буде пропорційна до $\approx \frac{1}{r^2}$ та $\approx \frac{1}{r^3}$.

Порівнюючи температурну залежність спонтанної поляризації P_c , мультипольного моменту ΔP та пірокофіцієнта $|\gamma|$ для нецентричних кристалів можна побачити, що спонтанна поляризація P_c для лінійних піроелектриків поступово знижується до температури плавлення T_m , але аналогічні дії для нелінійних піроелектриків зменшують цю поляризацію швидше, і в точці температури Кюрі θ спадає до нуля. При цьому така для лінійних піроелектриків при підвищенні температури пірокофіцієнт $|\gamma|$ зростає не набагато, а для нелінійних - у температурі Кюрі θ досягає свого максимуму (Рис.1.1).

Спонтанна поляризація у піроелектриках викликана не тільки зсувом іонних підґраток, а й конфігурацією електронної структури кристалу. Наприклад вуглець може мати кубічну структуру алмазу, а може бути піроелектричним в'юрцитом. На симетрію кристалічної ґратки може істотно впливати розподіл електронної щільності. Таким чином навіть прості за своїм складом (одноатомні) речовини можуть бути складними за структурою п'єзоелектриками. Симетрія електронної структури зумовлює власну полярність в одноатомних кристалах.

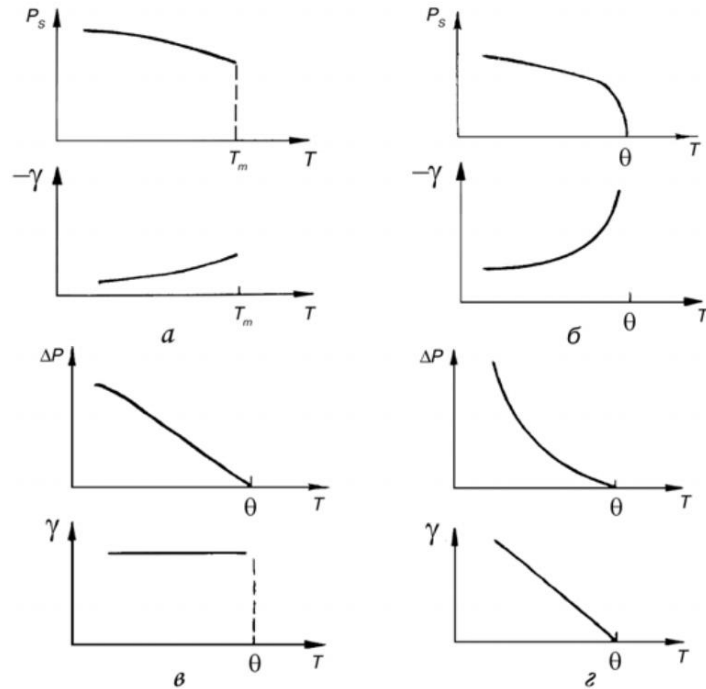


Рис. 1.1 Температурні залежності для спонтанної поляризації, пірокофіцієнта та мультипольного моменту: (а) – для піроелектрика, (б) – для сегнетоелектрика, (в) – для 2D п'єзоелектрика, (г) – для 3D п'єзоелектрика[4]

Окрім п'єзоелектриків власну поляризацію мають електрети та сегнетоелектрики. Але залишкова поляризація електретів зникає під час нагрівання або опромінення матеріалу, на відміну від спонтанної поляризації – вона визначає незмінний термодинамічний стан і є структурною особливістю полярного кристала.

Спонтанна поляризація P_c може змінюватися тільки під зовнішнім впливом на полярний діелектрик, але при поверненні кристала назад до початкових умов, відновлює своє значення.

Одним з проявів спонтанної поляризації у полярних кристалах є піроелектрика. При зміні температури кристала через його термічне розширення або через зміну впорядкованості змінюється і P_c , через що виникає піроелектричний потенціал (піроелектричний струм). При цьому прикладання зовнішнього електричного поля не може змінити напрям спонтанної поляризації піроелектрика.

Але існують такі полярні діелектрики у яких під впливом електричного поля P_c змінює свій напрям – сегнетоелектрики. Для них також характерне те, що в них P_c зменшується з підвищенням температури і зникає до того як кристал розплавиться [7].

Таким чином сегнетоелектрики можна визначити як підклас піроелектриків з піддатливим, нестійким поляризованим станом. Цей стан може змінюватися зовнішнім впливом – зміна температури, механічний тиск, введення електричного поля.

Сегнетоелектрики також мають деяку особливість спільну з ферромагнетиками – поділ на домени. Спонтанна поляризація в кожному окремому домені спрямована однаково, але при цьому напрями розрізняються для різних доменів. Такий поділ є енергетично вигідним через те що чим більший домен тим більше зовнішнє поле він створює. Тож однодоменна структура створює сильне зовнішнє електричне поле, в той час як структура з багатьма меншими доменами буде створювати менше електричне поле. Чим менший розмір домена тим менше буде електричне поле, але у процесі розділу на домени буде зростати енергія доменних стінок, які є бар'єром між ділянками з різним напрямом спонтанної поляризації. В залежності від зовнішнього середовища та температури утворюється стійка багатодоменна структура у якій розмір домена зазвичай дорівнює від 10^{-5} м до 10^{-3} м.

За впливу електричного поля E хаотично орієнтовані сегнетоелектричні домени набувають однакової орієнтації, і при цьому чим більший вплив E тим більш насиченою стає поляризація P_c . При подальшому зниженні E до нуля домени все одно залишаються однаково орієнтованими, через те що поляризація без дії зовнішнього поля прагне зберегти уставлений напрямок (рис. 1.2).

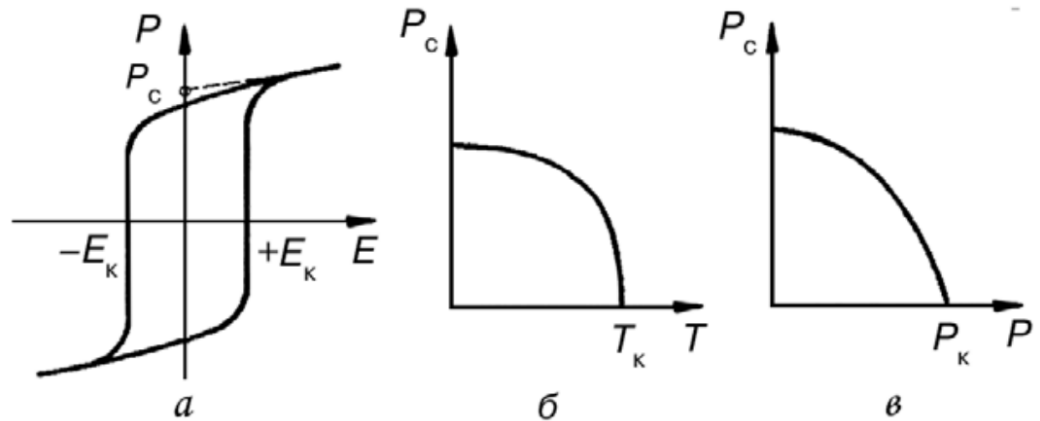


Рис. 1.2. Залежність в сегнетоелектриках: (а) – поляризації P від напруженості електричного поля E , (б) – спонтанної поляризації P_s від температури, (в) - спонтанної поляризації P_s від тиску p [4]

Для того щоб змінити напрям спонтанної поляризації треба змінити напрям зовнішнього електричного поля що прикладається, і при збільшенні його в напрямку, протилежному до напрямку спонтанної поляризації, вона без зміни свого абсолютного значення P_s , змінить свій напрям на протилежний.

Щоб відбулася така переполяризація, до сегнетоелектрика потрібно прикласти певну величину електричного поля, яку називають коерцитивною E_k . Якщо E_k сягає високих значень, тоді сегнетоелектричний кристал стає подібним до піроелектричного. Але при цьому з нагріванням такого сегнетоелектрика його E_k швидко знижується з наближенням до температури Кюрі T_k , і біля самої точки $T = T_k$ коерцитивне поле E_k та спонтанна поляризація P_s стають нулем, таким чином спостерігається діелектричний гістерезис. На відміну від сегнетоелектрика, у піроелектрику немає точки Кюрі, а E_k значно перевищує величину поля електричного пробоя, через що піроелектрик знищиться перш ніж змінить напрям поляризації.

Таким чином діелектричний гістерезис – та сама відмінна риса між сегнетоелектриком та піроелектриком. При температурі вищій за T_k петля гістерезису зникає, як і сегнетоелектричний стан (рис. 1.2(б)). Аналогічно на

спонтанну поляризацію впливає і зростання гідростатичного тиску (рис. 1.2(в)). За дуже високого тиску спонтанна поляризація сегнетоелектрика зникає, в той час як піроелектрик і під високим тиском зберігає свою спонтанну поляризацію до того як сам кристал буде зруйнований.

Велике значення для сегнетоелектриків має ангармонізм, який спостерігається в коливаннях іонів, що означає що «квазіпружний» зв'язок обопільним зміщенням іонів кристала – нелінійний.

Для дослідження, за спрощену модель, використовують одновимірний ланцюг іонів. Розкладемо енергію U цього ланцюга в ряд по розміру пружних зміщень x :

$$U(x) = \frac{1}{2}cx^2 + \frac{1}{4}bx^4 + \dots \quad (1.5)$$

В лінійних діелектриках щоб розглянути поляризацію достатньо зупинитись на $U(x) = \frac{1}{2}cx^2$, а для виявлення ролі ангармонізму на (1.5). Воно включає в себе коефіцієнт пружності c з квадратичним членом розкладання енергії та коефіцієнт ангармонізму $b > 0$ з першим ангармонічним членом. Спрощення полягає в тому, що полярні сегнетоелектричні кристали не центросиметричні, а у неполярній фазі (за температури більше точки Кюрі T_k) вважаються центросиметричними.

При переході в стан при температурі нижче за T_k (спонтанно поляризований), в ряд (1.5) додається ще один член:

$$U(x) = \frac{1}{2}cx^2 + \frac{1}{4}bx^4 - Fx \quad (1.6)$$

де F – величина напруженості спонтанного електричного поля (внутрішнього).

Нижче від T_k виникає спонтанна деформація (постійне зміщення x_c), при якій енергія $U(x)$ сягає свого мінімуму. Через те що при $x = x_c$ спонтанно поляризований стан рівноважний, то загальна сила діюча на цю систему зарядів дорівнює нулю:

$$\text{при } x = x_c, \frac{\partial}{\partial x} U(x) = 0, \text{ а отже } cx_c + bx_c^3 - F = 0 \quad (1.7)$$

Коерцитивне поле можемо розписати як $F_c = \beta P_c$, де β – коефіцієнт Лоренца. Для даної моделі можна подати спонтанну поляризацію як добуток концентрації n на заряд іонів q на постійне зміщення x_c : $P_c = nq^2 x_c$. Тоді після підстановки у (1.7), отримаємо:

$$cx_c + bx_c^3 - \beta nq^2 x_c = 0 \quad (1.8)$$

Розв'язавши таке кубічне рівняння отримуються розв'язки:

$$x_1 = 0; x_{2,3} = \frac{\sqrt{nq^2\beta \pm c}}{b} \quad (1.9)$$

Перший розв'язок нам не підходить через те, що ми розглядаємо спонтанно поляризовану фазу, у якій спонтанна деформація $x_c \neq 0$, таким чином перший розв'язок неможливий для температури нижче точки Кюрі.

Отже далі розглядаємо тільки другий і третій розв'язки. Їх відмінність тільки у знаку демонструє протилежність по напрямку спонтанної поляризації, таким чином іони зміщуються на однакову відстань x_c але у протилежних напрямках. Виходить що спонтанна поляризація у одній частині кристала сегнетоелектрика напрямлена в один бік, а в іншій частині – в інший. Ділянки з співнапрямленою P_c і називаються доменами.

Також видно що параметр ангармонізму b не може дорівнювати нулю, тож у кристалах зі слабким ангармонізмом неможливі спонтанні зміщення. Отже однією з визначальних властивостей сегнетоелектриків є наявність ангармонізму.

Окрім цього видно що дійсні корені будуть лише при значенні $\sqrt{nq^2\beta \pm c} > 0$. Якщо розв'язуючи цю нерівність помножити ліву та праву частини на деформацію, то отримаємо такий вираз:

$$nq^2\beta x > cx \quad (1.10)$$

Параметр s характеризує пружність, а частина sx має розмірність сили і показує силу протидії спонтанному зсуву у сегнетоелектрику. Тоді частина $nq^2\beta x$ також має розмірність сили, яка і призводить до сегнетоелектрики (ведуча взаємодія). Таким чином цю умову можна перефразувати так: в кристалах у яких ведуча взаємодія більша за пружну взаємодію виникає спонтанна поляризація.

Тоді можна сказати що передумовою для виникнення сегнетоелектрики є велика щільність кристала (n), підвищений фактор Лоренца (β) та велике значення електричного заряду (q). І дійсно це пояснює чому серед лужногалоїдних кристалах (наприклад $NaCl$) невідомі прояви сегнетоелектричності – у цих кристалах однозарядні іони і малий фактор Лоренца. На відміну від нього у титанаті барію $BaTiO_3$ – іон титану має валентність 4, отже його $q^2 = 16$, що в 16 разів більше. Також в титанаті барію фактор Лоренца у 5 разів вищий через його структуру типу первокситу.

Загальна формула первокситу ABO_3 зображена на рис. 1.3. В ньому малий за розмірами катіон B^{+4} оточений октаедром з великих аніонів O^{-2} , які відштовхують один одного і залишають всередині октаедра достатньо місця для зміщення катіона. Зміщення цього іона створює найбільший внесок до дипольного моменту елементарної комірки, внаслідок якого і утворюється спонтанна поляризація.

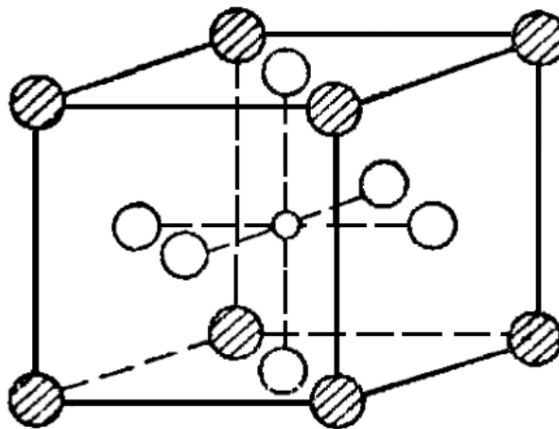


Рис. 1.3. Кристалічна гратка первокситу загального виду ABO_3 [4]

Відмінною ознакою первокситових сегнетоелектриків є наявність поперечного оптичного коливання, які за своєю природою фазового переходу відносяться до сегнетоелектриків типу зміщення.

В іншому класі сегнетоелектриків, з типом фазового переходу «порядок-безпорядок», постійна Кюрі-Вейса має на декілька порядків менші значення, а температура фазового переходу наближається до значення температури Кюрі-Вейса (табл. 1.1).

Цікавою особливістю кристалів з фазовим переходом «порядок-безпорядок» є ізотопний ефект – при заміні водню на дейтерій точка Кюрі зміщується. Отже водневі зв'язки дуже важливі для такого типу сегнетоелектриків.

Третій широковідомий клас сегнетоелектриків це халькогеніди – сегнетоелектричні кристали що не мають кисню. Для них характерним є маленька ширина забороненої зони, тобто вони належать до сегнетоелектриків-напівпровідників.

Як вже було сказано, сегнетоелектрики поділяються на домени, тобто це багатодоменна структура, яка є більш енергетично вигідною. Проте інколи у техніці необхідні однодоменні сегнетоелектричні кристали. Наприклад в датчиках температури у телевізійних трубках, для перетворення ІЧ зображення на видиме зображення на екрані. Для того щоб з багатодоменного сегнетоелектрика зробити однодоменний кристал використовуються такі методи як радіоактивне випромінювання, введення домішок які унеможливають утворення та зміщення доменних стінок та електронна поляризація зовнішнім полем.

Таблиця 1.1 – Деякі класи сегнетоелектричних кристалів та їх характеристики[4]

Клас	Речовина	$P_c,$ мкКл $\cdot \text{см}^{-2}$	T_K, K	θ, K	$3 \cdot 10^{-4},$ К	W_g, eV	$\frac{A}{2\pi},$ ГГц $\cdot \text{K}^{-1/2}$
Складні оксиди типу перовскиту	CaTiO ₃	-	-	-90	4,5	3,2	170
	SrTiO ₃	-	-	35	8,4	3,2	180
	BaTiO ₃	30	400	388	12	3,3	75
	PbTiO ₃	80	780	730	15	3,1	90
	KNbO ₃	30	685	625	18	3,4	95
	LiNbO ₃	70	1500	-	-	3,6	-
Кристали з водородними зв'язками	сегнетова сіль	0,25	297	291	0,17	-	-
		-	255	257	0,14	-	-
	дейтованасегнетова сіль	-	308	300	-	-	-
		0,35	251	253	-	-	-
	ТГС	2,8	322,7	322	0,28	-	8,1
	ДТГС	3,2	327,5	327	0,27	-	10
КДР	4,7	123	118	0,28	-	180	
ДКДР	4,8	216	208	0,31	-	37	
Халькогеніди	SbSI	50	295	285	23	1,9	-
	SbSBr	10	95	82	12	2,2	-
	PbTe	-	-	-	14	0,2	-

1.1 Нелінійність сегнетоелектриків

Головною особливістю сегнетоелектриків, що відображена у їх визначенні є переполяризація доменів. Гістерезис в сегнетоелектриках (рис.1.4), як і в феромагнетиках, має місце через переполяризацію доменів. Домени спочатку орієнтуються зі збільшенням напруженості E (штрихова крива на рис. 1.4), але після точки насичення ріст поляризації сповільнюється.

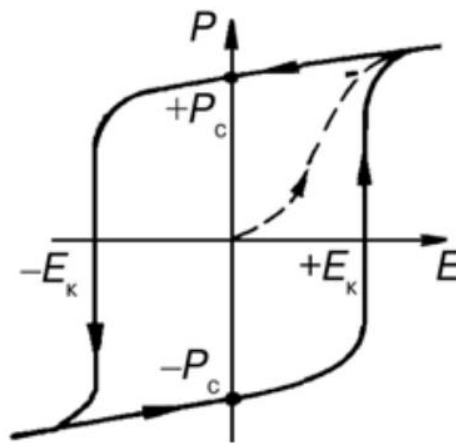


Рис. 1.4 Діелектричний гістерезис в сегнетоелектриках [4]

При зменшенні напруженості поля зменшується індукована поляризація, але при цьому спонтанна поляризація залишається і при $E = 0$. При зміні знаку поля спочатку змінюється тільки лінійна частина петлі гістерезису (індукована поляризація), але при досягненні коерцитивного значення поля E_k спонтанна поляризація різко змінює своє значення з $+P_c$ на $-P_c$. При подальшому змінненні поля зміна відбувається знову, тобто виникає цикл. Саме тому і виникає петля гістерезису при зміні $P(E)$.

Такі рівні за значенням але протилежні за знаком значення спонтанної поляризації $+P_c$ та $-P_c$ можуть зберігатися у сегнетоелектричних кристалах тривалий час. Тим самим вони можуть забезпечувати для запам'ятовувальних

пристроїв ЕОМ запис та зберігання інформації двійковим кодом. Це працює таким чином: імпульс з позитивною полярністю орієнтує домени та спричиняє залишкову поляризацію рівну $+P_c$. Якщо зчитувальний імпульс буде додатнім то переполаризації не відбудеться і струм буде малим. Якщо ж спочатку був записаний імпульс негативної полярності, то додатній зчитувальний імпульс спричиняє переполаризацію. Відбувається стрибок з $-P_c$ до $+P_c$, і електричний струм проходить через конденсатор. За таким самим принципом сегнетоелектрична плівка в мікросхемі може керувати струмом транзистора[4,7].

1.2 Сегнетоелектричні плівки

У багатьох галузях приладобудування та електроніки все більше використовуються сегнетоелектричні плівки. Вони використовуються в багатьох напрямках в залежності від необхідних характеристик. Найбільш актуальними напрямками застосування є: основані на активних діелектриках складові НВЧ, мікросистеми поєднуючиактуатори, процесори і сенсори, інтегровані з напівпровідниками надтонкі сегнетоелектричні плівки. Більше застосування сегнетоелектричних плівок показано в таблиці 1.2.

Для виготовлення сегнетоелектричних плівок існує багато методів, які застосовуються в залежності від технологічних можливостей. Обирається та технологія яка зможе забезпечити сумісність з іншими елементами системи у якій повинна використовуватися для того щоб було можливо виготовити інтегрований пристрій єдиним технологічним процесом. За принципом виготовлення сегнетоплівок методи поділяються на фізичне випаровування та хімічне нанесення (див. табл. 1.3). Від того яким способом була утворена плівка її властивості можуть істотно відрізнятися.

Таблиця 1.2 – Основні застосування сегнетоелектричних плівок

№	Використовувана характеристика	Де використовується
1.	П'єзоелектрика	Біморний актюатор
2.	Електрооптичний ефект	Електрооптичний модулятор
3.	Сегнетоелектрика (гістерезис спонтанної поляризації)	Енергонезалежна пам'ять
4.	Акустооптичний ефект	Бреговський акустооптичний відбивач
5.	Піроелектрика	Інфрачервоний датчик
6.	Велика діелектрична проникність	Багатошаровий керамічний конденсатор

При тому що одні й ті ж плівки можуть бути утворені різними методами, але через спосіб нанесення вони будуть мати різні властивості. Таким чином плівка отримана методом бомбардування підкладки підходить для отримання динамічної (DRAM) пам'яті, при цьому при використанні її в FeRAM пам'яті EOM веде до її швидкої деградації властивостей.

1.3 Властивості ПВДФ

Сегнетоелектричні полімери, такі як полівініліденфторид (ПВДФ), є дуже привабливими для багатьох застосувань, оскільки вони демонструють хороші п'єзоелектричні та піроелектричні реакції [8,9]. Що більш важливо, вони можуть бути адаптовані відповідно до різних вимог. Загальноприйнятим підходом для підвищення діелектричної проникності є диспергування керамічного порошку з високою діелектричною постійною в полімерах [10]. Популярними керамічними порошками є комплекси на основі свинцю, такі як $PbTiO_3$ і $Pb(Zr, Ti)O_3$. Це може бути недоліком, в багатьох галузях оскільки свинець (як і інші важкі метали) є

Таблиця 1.3 – Порівняльна таблиця методів виготовлення сегнетоелектричних плівок

Процес	Місткість процесу	Для яких плівок застосовується	Хімічна формула
Фізичний випар з бомбардуванням іонами низької енергії	Магнетронне розпилювання	BT PT BST PZT	$BaTiO_3$ $PbTiO_3$ $Ba(Sr,Ti)O_3$ $Pb(Zr,Ti)O_3$
	Напилювання іонними пучками	PZT - PZ	$KNbO_3$ $PbZrO_3$
	Абляція ексимерним лазером	Bi PZT PG SBT BT	$Bi_4Ti_3O_{12}$ $Pb_5Ge_3O_{11}$ $SrBi_2Ta_2O_9$
	Напилювання електронного циклотронного резонансу (ECR)	Bi PZT PG	
	Плазменний хімічний випар (PECVD)	PT BT PZ	
	Хімічне нанесення без бомбардування	Метод золь-гель	PT PZT BST SBT
Металоорганічне нанесення (MOD)		PT PZT	$LiNbO_3$
Термічне й електронно-променево випаровування мішені		PG PZT BT	$SbSI$
Хімічне випаровування (CVD)		PT PZT BST	BiT
Металоорганічний хімічний випар (MOCVD)		PT PZT BST	BiT
Молекулярно-променево епітаксія (MBE)			$BaMgF$

шкідливим для живого організму. Також при високому завантаженні частинками полімери втрачають свою гнучкість і отримують ламкий композит низької якості. Але якщо використовувати процедуру змішування комбінацій ПВДФ і дешевих металевих порошоків, то отримується безпечний та гнучкий композит високої якості. Зокрема, для виготовлення таких композитів використовували порошки нікелю (Ni). В такому композиті середнє значення діелектричної проникності збільшуються від значень менше 10 до приблизно 400. Таким чином властивості ПВДФ поєднуються з його безпечністю що відкриває для нього використання у таких сферах як біомедицина та інше[11].

ПВДФ - це високоефективний фтормісткий інженерний пластик, в основі якого лежить вуглецевий лінійний зв'язок. Окрім того що він дуже міцний, стійкий до корозії, непроникний для газів та рідин, має високу ступінь кристалічності і термічну стабільність, фізіологічно інертний, має низьку займистість, стійкий до повзучості при підвищених температурах він ще має сегнетоелектричні властивості. На відміну від інших фторопластів в ньому може виникати спонтанна поляризація, яка і є джерелом сегнетоелектричності. Це явище було відкрито ще у 1969 році Х. Дж. Кавай[12], після чого ПВДФ почав набирати своєї популярності. Зараз він використовується в багатьох галузях: медицина (для створення матеріалів у медичинській техніці; в протезуванні; використовується в імуноблоті як штучна мембрана (зазвичай з розмірами пор 0,22 або 0,45 мікрметра), на яку білки переносяться за допомогою електрики[13]; у приладах акустичного імпедансу в біологічних тканинах); використовується як труби, листи та внутрішні покриття у високотемпературних, гарячих кислотах та радіаційних середовищах; у виробництві матриць тактильних датчиків, недорогих тензодатчиків і легких аудіо перетворювачів; є стандартним сполучним матеріалом, який використовується у виробництві композитних електродів для літій-іонних акумуляторів [14]; а також п'єзоелектричні панелі з ПВДФ використовуються на лічильнику пилу

VenetiaBurneyStudent, науковому приладі космічного зонда NewHorizons , який вимірює щільність пилу у зовнішній Сонячній системі [15].

1.4 Конформації полівінілденфториду

ПВДФ - це не тільки високоефективний інженерний пластик з високою механічною міцністю та хімічною стійкістю, а й багатофункціональний полімер з п'єзоелектричними, піроелектричними та сегнетоелектричними властивостями. Ці властивості походять від хімічної будови ПВДФ. Атоми фтора (F) негативні, і більш електронегативні ніж атоми вуглецю (C), тож група CF_2 полярна, в свою чергу позитивний водень (H) з атомом вуглецю утворює неполярний зв'язок. Полярність же всього ланцюга CH_2CF_2 залежить від його конформації (просторового розташування атомів у молекулі), де диполі CF_2 можуть розміщуватися паралельно та антипаралельно один відносно одного. Таким чином утворюється такі види конформацій ланцюга ПВДФ: транс-транс-транс-транс (TTTT або all-trans), транс-гош-транс-гош' (TGTG') та транс-транс-транс-гош-транс-транс-гош' (T3GT3G') (рис. 1.5).

Транс-конформація – така, що функціональні групи знаходяться по різні сторони вуглецевого ланцюга, при гош- конформації функціональні групи при сусідніх атомах вуглецю розташовані навхрест, так, що у проекції Ньюмена кути між напрямками зв'язків дальньої і ближньої функціональної групи дорівнюють 60° [16,17].

Ці конформації та їх взаємна упаковка і є причинами утворення поліморфів ПВДФ. Всі зазначені вище конформації є полярними через сумарний дипольний момент, але найбільший дипольний момент має all-trans конформація. Скласти ці

макромолекули в ланцюг можна лише одним способом, і при цьому їх дипольні моменти будуть додаватися, таким чином і утворюється β -фаза[18,19].

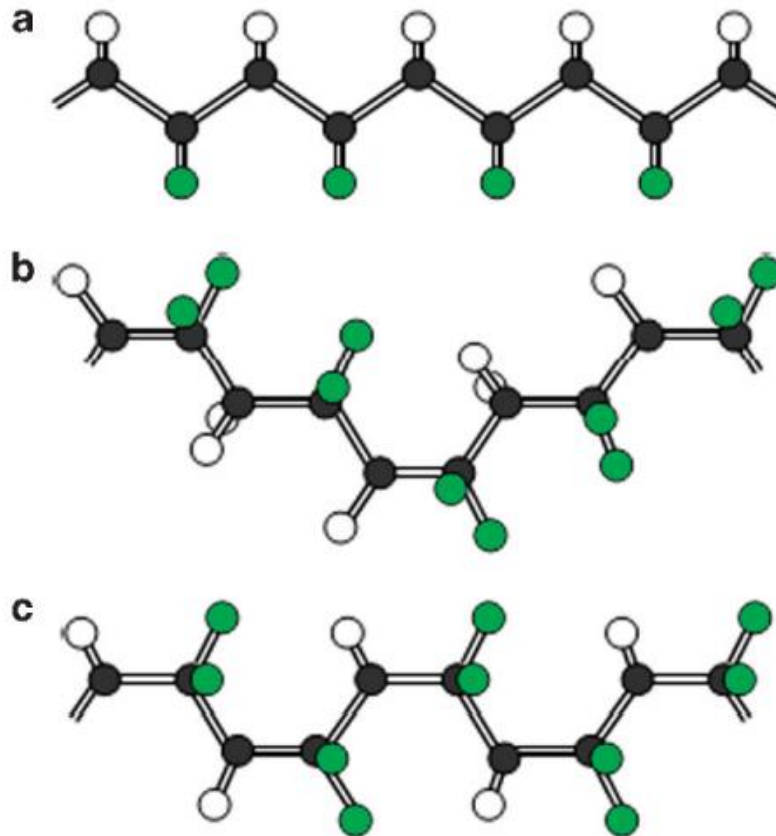


Рис. 1.5 Три конформації ланцюгів ПВДФ: (а) $TTTT$, (б) $T_3GT_3\bar{G}$ і (с) $TGT\bar{G}$ [18]

Окрім неї дві інші конформації можуть бути упаковані паралельним та антипаралельним чином, що і утворює ще 4 фази. Найбільш поширеною і раніше відкритою є α -фаза, яка представляє собою антипаралельну упаковку $TGTG'$ конформації, але через свою неполярність вона не є такою цікавою як β -фаза, тож через це β -фаза також називається I формою, а α -фаза- II формою (табл.1.4).

Форма I має найбільшу спонтанну поляризацію P_s з трьох полярних поліморфів ПВДФ, оскільки всі молекулярні диполі вирівняні в одному напрямку. Спонтанна поляризація може бути переключена під дією сильного електричного поля, тому форма I ПВДФ є сегнетоелектриком.

Таблиця 1.4 – Порівняльна таблиця фаз ПВДФ

Фаза	Форма	Конформація ланцюга	Пакування ланцюгів	Полярність	Просторова група
α	II	TGTG $\bar{}$	$\uparrow\downarrow$	неполярна	P2cm
β	I	TTTT	$\uparrow\uparrow$	полярна	Cm2m
γ	III	T $\bar{3}$ GT $\bar{3}$ G'	$\uparrow\uparrow$	полярна	C2
δ	IV	TGTG $\bar{}$	$\uparrow\uparrow$	полярна	P2
ϵ	V	T $\bar{3}$ GT $\bar{3}$ G'	$\uparrow\downarrow$	неполярна	

Форма I складається з усіх транс-молекул, упакованих паралельно. Форма II складається з молекул транс-гош-транс-мінус гош (TGT \bar{G}), упакованих антипаралельним способом. Проміжна конформація T $\bar{3}$ GT $\bar{3}$ G $\bar{}$ сприяє паралельній упаковці для створення форми III. Існує паралельна версія Форми II, яка називається Формою IV. Що стосується молекулярної упаковки цих форм, то «паралельні» та «антипаралельні» пов'язані з орієнтацією диполя в напрямку, перпендикулярному до осі ланцюга. Відповідно, форми I, III і IV є полярними кристалами і мають спонтанну поляризацію P_s [18,20].

Форма I має найбільшу спонтанну поляризацію P_s з трьох полярних поліморфів ПВДФ, оскільки всі молекулярні диполі вирівняні в одному напрямку. Спонтанна поляризація може бути переключена під дією сильного електричного поля, тому форма I ПВДФ є сегнетоелектриком. Обидві форми III і IV є полярними

через їхню паралельну упаковку. Форма V набагато менш досліджена через її відносно нещодавнє відкриття і її неполярність, отже для подальших досліджень вона не є цікавою[18,21].

Висновки до розділу 1

До активних діелектриків зараз спостерігається підвищений інтерес, через їх широке застосування у сферах електроніки, електробудування, наноелектроніки та інших. Активними діелектриками називають матеріали які проявляють сегнетоелектричні, піроелектричні або п'єзоелектричні властивості.

Застосування сегнетоелектричних плівок стало поширеним з моменту коли вперше змогли з'єднати їх з напівпровідниковим процесором в одну структуру. Такі плівки можуть бути піроелектричними, п'єзоелектричними або сегнетоелектричними, і їх поєднання разом з напівпровідником відкриває нові можливості в застосуванні – сегнето-напівпровідниковий інтегрований пристрій. Це сучасний напрям у мікроелектроніці - система добре з'єднана та має високу щільність елементів, і при цьому вона є багатофункціональною. Зараз галузь використання таких систем розвивається, а інтегровані пристрої широко використовуються у комп'ютерній техніці.

Наступним кроком стало дослідження сегнетоелектричних полімерів – вони мають такі ж властивості як і сегнетоелектричні плівки, але при цьому набагато безпечніші і простіші у виробництві та використанні.

Особливо відрізняється на фоні інших полімерів – ПВДФ, його I форма є сегнетоелектричною що відкриває багато галузей для її використання і робить її цікавою для подальших досліджень.

2. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПВДФ ТА РОЗРАХУНОК ХАРАКТЕРИСТИК

Для дослідження all-trans конформації був обраний шлях моделювання I форми ПВДФ в програмному забезпеченні GaussView для подальшого дослідження її властивостей за допомогою квантово-хімічного пакету Gaussian09.

Gaussian09 пропонує різні точні енергетичні методи для прогнозування термохімічних величин, фотохімії та інших процесів у збудженому стані, а вплив розчинника можна враховувати при оптимізації структур і прогнозуванні більшості молекулярних властивостей[22].

GaussView — це графічний інтерфейс користувача, розроблений для полегшення гаусового графічного сприйняття. Він не є інтегрованим з обчислювальним модулем Gaussian09, а скоріше представляє візуалізатор, який допомагає його використовувати.

Для того щоб почати її дослідження потрібно збудувати цю молекулу у вигляді що відповідає дійсності. Для цього спочатку потрібно знайти повну інформацію про міжатомні зв'язки та про кути нахилу для I форми ПВДФ.

2.1 Структура ПВДФ

Для того щоб правильно збудувати полімер потрібно знати його структуру, склад, атомні відстані та кути нахилу.

Для кожної форми ПВДФ ці значення відрізняються, у обчисленому кристалі Форми I довжина зв'язку $C - H$ становить $1,090 \text{ \AA}$, $C - F$ становить $1,368 \text{ \AA}$ і $C - C$ становить $1,528 \text{ \AA}$, кут $H - C - H$ дорівнює $108,01^\circ$, $F - C - F$

становить $105,41^\circ$, а $C - C - C$ дорівнює $114,1^\circ$. Довжина зв'язку і кут $C - C - C$ не на багато, але перевищують аналогічні значення для поліетилену ($2,534 \text{ \AA}$ і $112,1^\circ$). Це може бути викликано відштовхуванням між атомами фтору, які зв'язані з різними атомами вуглецю. Зв'язок $C - F$ довший, ніж його типове значення ($1,34 \text{ \AA}$), а кут $F - C - F$ менший, ніж у тетраедра ($109,51^\circ$). Відстань $F - F = 2,176 \text{ \AA}$, тобто майже ніж у два рази більша за радіус Ван-дер-Ваальса фтору ($1,35 \text{ \AA}$). Це говорить про те, що два атоми фтору, пов'язані з одним і тим же атомом вуглецю, мають деяку притягуючу взаємодію. Слід зазначити, що статистичне відхилення ланцюгів, визначене рентгеноструктурним аналізом, не можна було змоделювати в цьому розрахунку, оскільки лише одна мономерна одиниця повторювалася з періодичною граничною умовою [18].

2.2 Побудова полімера

Для того щоб збудувати all-trans конформацію по визначених даних у середовищі GaussView потрібно спочатку створити нову молекулу та відповідне вікно перегляду, натиснувши кнопку «New» на панелі інструментів і вибрати «Create Molecule Group» (створити групу молекул). Полівінілденфторид за своєю структурою нагадує поліетилен, отже починати будову структури ми будемо саме з нього. Робимо вініловий фрагмент (етилен) «поточним фрагментом», двічі клацнувши кнопку на панелі інструментів «R-Group Fragment» (фрагмент R-групи), а потім клацнувши кнопку «вініл» на палітрі «R-Group Fragment». Тоді клацнувши на будь-яке місце в порожньому вікні, створюється молекула етилену. Відцентрувавши молекулу у вікні перегляду, натисканням кнопки «Center» (центр) на панелі інструментів. Вмикаємо мітки атомів для вікна перегляду, поставивши прапорець «Labels» (мітки) та «Symbols» (символ) в меню «View» (вигляд) головного вікна, після чого бачимо молекулу етилену у такому вигляді (рис. 2.1).

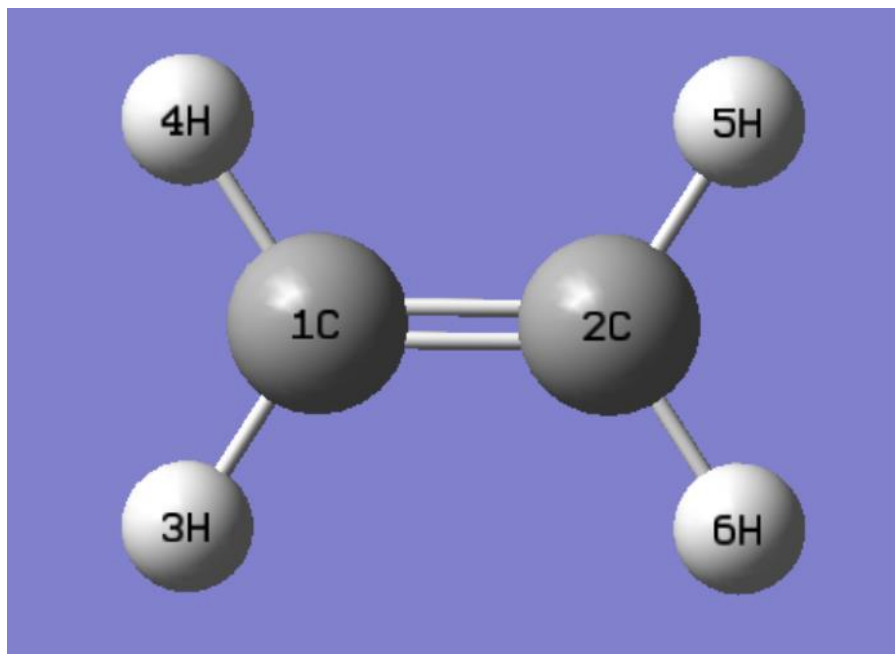


Рис. 2.1 Молекула етилену в GaussView

Далі у вікні перегляду натискаємо на атом 5 етилену, щоб створити молекулу транс-бутадієну (рис. 2.2).

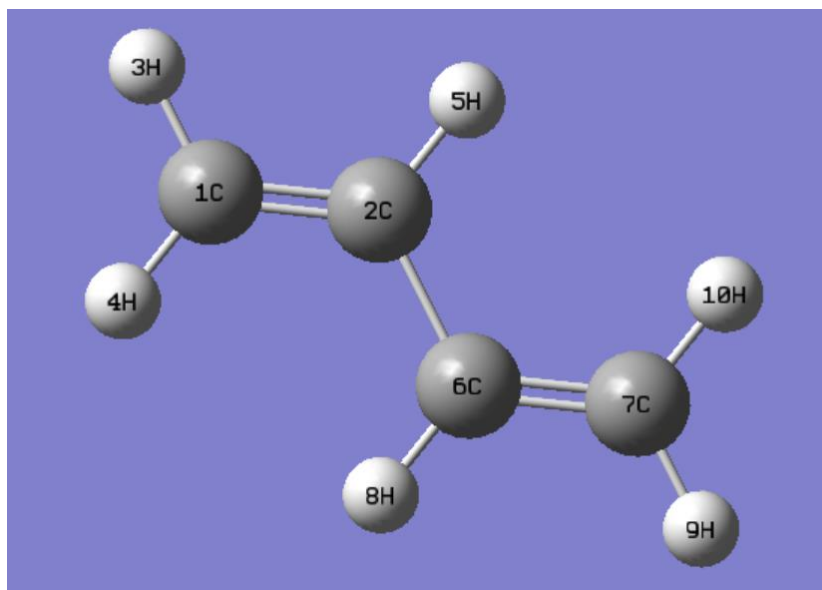


Рис. 2.2 Молекула транс-бутадієну в GaussView

Але для подальшої побудови нам потрібен саме диметилфторид ($C_2H_2F_2$), тож цю молекулу треба змінити до правильного вигляду. Для потрібної молекули нам потрібно щоб кожен карбон (C) зв'язаний з двома гідрогенами (H) чередувався з карбоном (C) пов'язаним з двома атомами фтору (F). За допомогою функції «Delete Atom» (видалити атом) треба прибрати зайвий гідроген з 7-го карбону. Далі за допомогою меню «Element Fragment» (фрагменти елементів) (рис. 2.3) обираємо фтор у таблиці елементів яка з'явилась, при цьому треба обрати саме одиничний атом, після чого клацнувши по атому гідрогену зв'язаному з 2-м та 7-м карбоном ми їх заміняємо, і таким же чином ставимо ще по одному атому фтору поруч з вже поставленими. Отримана молекула представлена на рис.2.4.

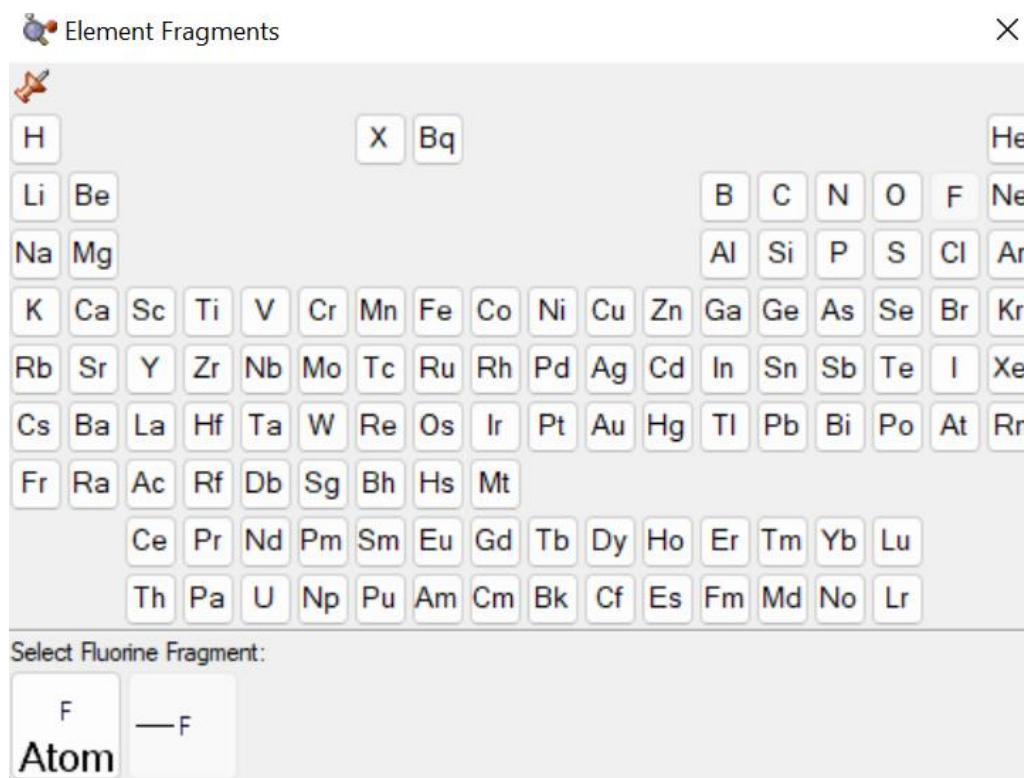


Рис. 2.3 Зовнішній вигляд меню «Element Fragment» (фрагменти елементів)
у GaussView

Для того щоб з молекули транс-діфторетилену скласти полівінілденфторид треба зробити її полімером. Для цього викликавши діалогове вікно «PBC» (Periodic Boundary Conditions – періодичні граничні умови) для молекули, вибравши «PBC» в меню «Edit» головного вікна. На вкладці «Symmetry» (симетрія) діалогового вікна PBC вибираємо «Один» зі спадного списку «Lattice Dimension» (розміри решітки).

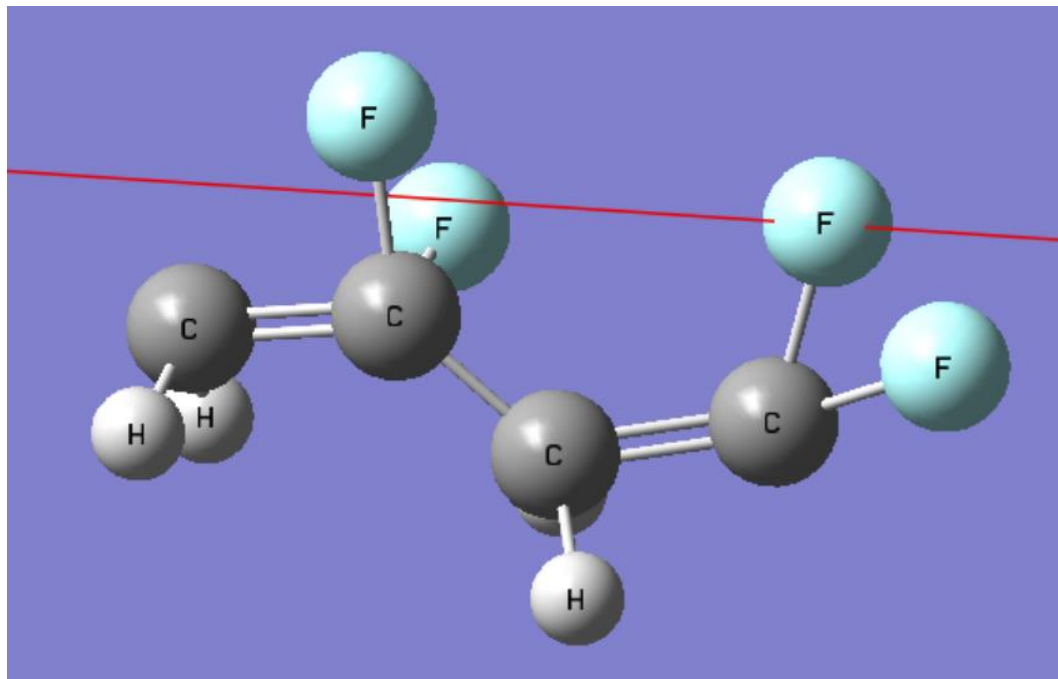


Рис. 2.4 Молекула транс-діфторетилену в GaussView

На вкладці «Cell» (Комірка) діалогового вікна PBC натискаємо кнопку «Place» (Помістити) і переконуємося, що вибрано «Vertex» (Вершина), щоб дозволити розміщення вершини початку комірки (O (0)) у будь-якому атомі, вибраному у вікні перегляду за допомогою миші, і тоді у вікні перегляду натискаємо на атом 2C.

На вкладці «Cell» діалогового вікна PBC вибираємо (1) замість O (0), щоб увімкнути розміщення вершини комірки «a» на будь-якому атомі, вибраному у вікні

перегляду за допомогою миші, після чого у вікні перегляду натискаємо на атом 7 (рис. 2.5).

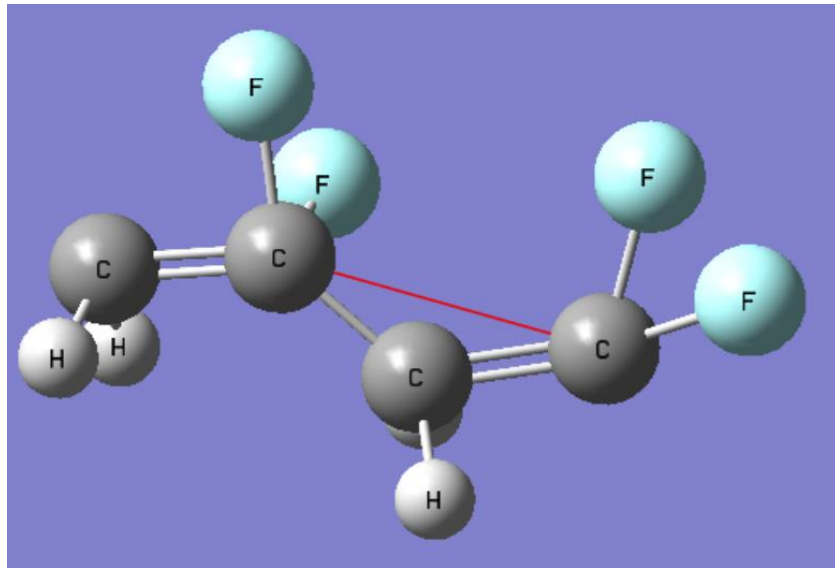


Рис. 2.5 Молекула транс-діфторетилену з позначеними вершинами елементарної комірки

На вкладці «Cell» діалогового вікна PBC вибираємо «Delete All Atoms Outside Cell» (Видалити всі атоми за межами комірки) зі спадного списку «Trim Contents» (Обрізати вміст). Таким чином отримуємо складову майбутнього полімера (рис. 2.6).

На вкладці «Cell» діалогового вікна PBC натискаємо кнопку «Center Contents» (Вміст у центрі), і отримуємо відцентроване за віссю зображення (рис. 2.7).

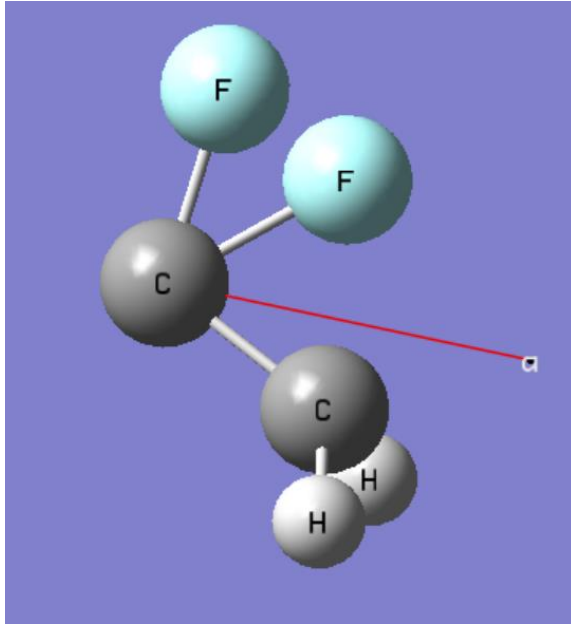


Рис. 2.6 Елементарна комірка полівінілденфториду

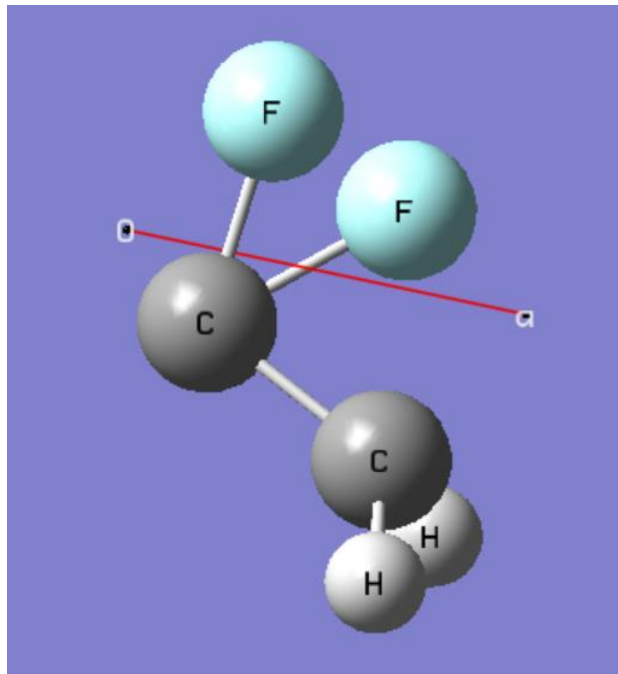


Рис. 2.7 Відцентрована елементарна комірка полівінілденфториду

На вкладці «View» (Вид) діалогового вікна PVC показуємо дві клітинки вздовж осі «а», вибравши 2 у відповідному полі обертання в розділі «Cell Replication» (Реплікація клітинки). За замовчуванням вміст повторюваних клітинок відображається у форматі нижнього шару (рис. 2.8).

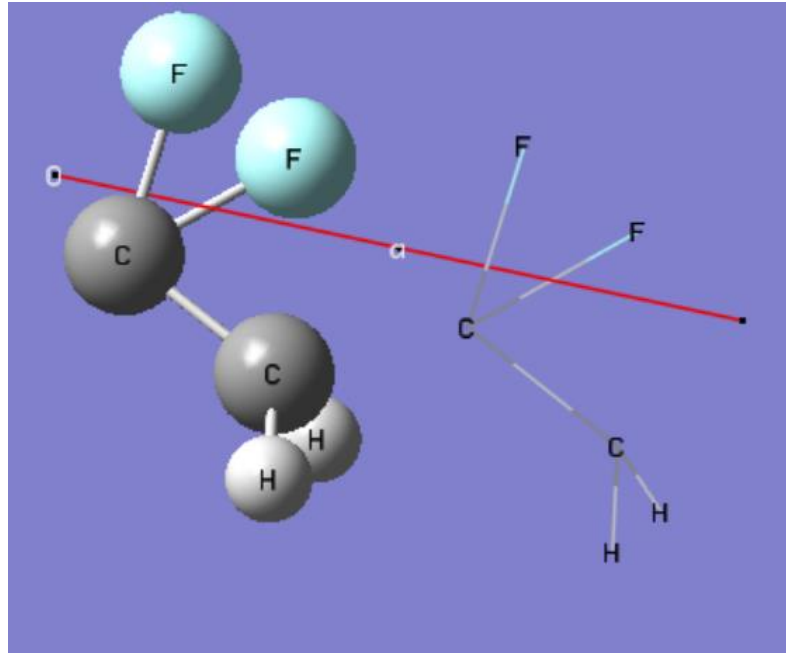


Рис. 2.8 Елементарна комірка ПВДФ з повторюваною клітинкою у форматі нижнього шару

На вкладці «View» діалогового вікна PVC виберіть «Normal» (Звичайний) зі спадного списку «Replicate Contents Display» (Відображення реплікації вмісту), щоб відобразити вміст клітинок, що повторюються, у тому ж форматі, що й вміст комірки опорного блоку (рис. 2.9).

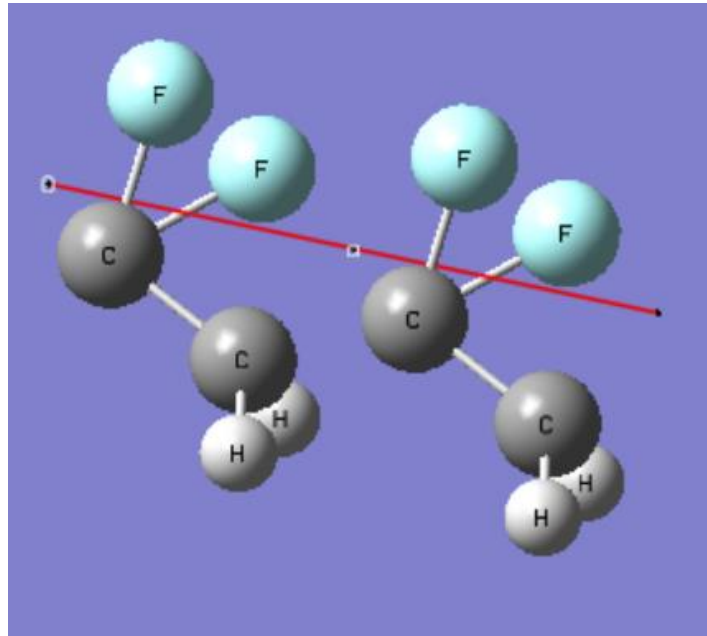


Рис. 2.9 Повторювана клітинка з опорною клітинкою в одному форматі.

На вкладці «Contents»(зміст) діалогового вікна PVC виберіть пункт «Rebond Intercell» (Перебудувати зв'язки між комірками) у спливаючому меню «Bonds» (Зв'язки), щоб оновити зв'язок між атомами в сусідніх клітинках (рис. 2.10).

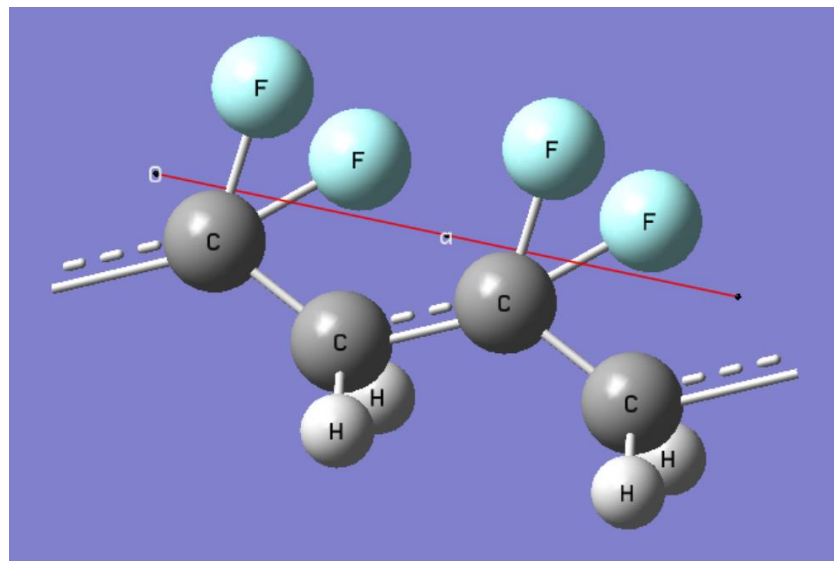


Рис. 2.10 Опорна та повторювана клітинки з перебудованими зв'язками

Довжини зв'язку C-C всередині елементарної комірки занадто великі в порівнянні з експериментом, отже змінюємо довжину внутрішньоклітинного зв'язку між атомами 1 і 3, натиснувши кнопку «Modify Bond» (Змінити зв'язок) на панелі інструментів, а потім клацнувши атоми 1 і 3 у тій самій клітинці у вікні перегляду. У відповідному діалоговому вікні «Semichem Smartslide» змінюємо значення довжини зв'язку з 1,54 Å до 1,528 Å (за даними у п.2.1) у полі введення, а потім натискаємо кнопку ОК.

Після чого змінюємо довжину між самими елементарними комірками (між опорною та повторюваною), натискаємо кнопку «Modify Bond» на панелі інструментів, а потім клацнувши атоми 3 і 1 у сусідніх клітинках у вікні перегляду. У відповідному діалоговому вікні Semichem Smartslide змінюємо значення довжини зв'язку з 1,38253 Å на 1,528 Å (п 2.1) у полі введення, а потім натискаємо кнопку ОК. Окрім цього також потрібно замінити на правильні величини зв'язок (C – F) = 1,368 Å та (C – H) = 1,090 Å за таким самим алгоритмом дій.

Якщо ми робимо ці зміни лише в опорній елементарній комірці то це автоматично переноситься і на повторювану елементарну комірку.

Також ми згадуємо що кути між зв'язками для All-trans конформації ПВДФ також повинні бути конкретними значеннями. Для того щоб це змінити треба вибрати кнопку «Modify Angle» (Змінити кут) з основного меню, після чого нам потрібно вибрати 3 атоми між якими ми і будемо змінювати кут. Після чого впливає вікно Angle Semichem Smartslide, в якому за замовченням 2-й вибраний нами атом буде зафіксований, а 1-й і 3-й будуть зміщуватися для змінення кута між ними, за бажанням можна поміняти фіксовані атоми і ті які будуть рухатися. Таким чином ми виставляємо кути для ПВДФ All-trans конформації з'ясовані в п.2.1:

$$\begin{aligned}
 H - C - H &= 108,01^\circ \\
 F - C - F &= 105,41^\circ \\
 C - C - C &= 114,1^\circ
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

Після чого на вкладці «Contents» діалогового вікна PVC вибираємо пункт «RebondAll» зі спливаючого меню «Bond», щоб оновити зв'язок між атомами в тій самій комірці, а також у сусідніх клітинках (рис. 2.11).

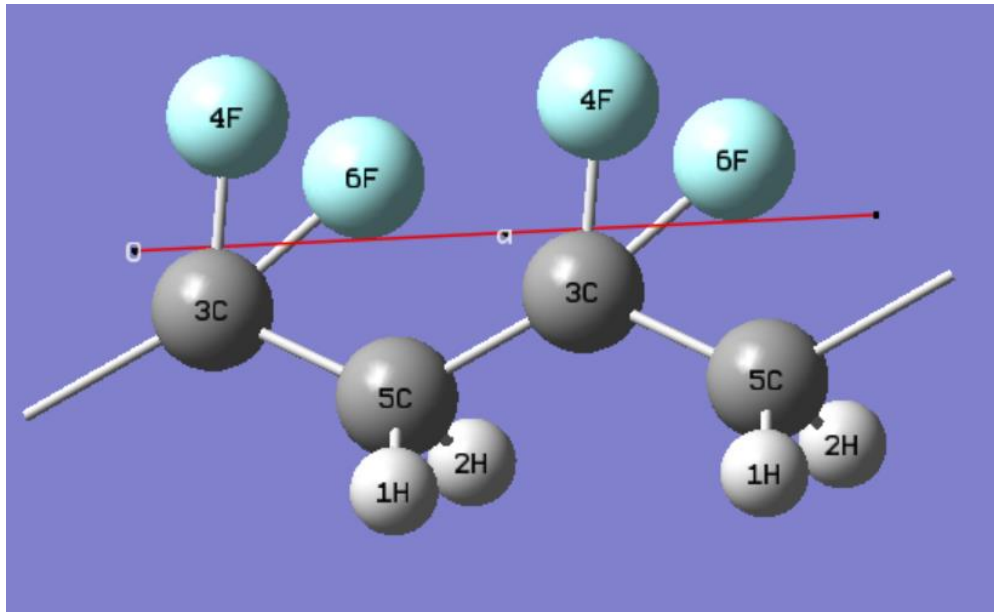


Рис. 2.11 Опорна та повторювана клітинки з правильними зв'язками та довжинами зв'язків.

На вкладці «View» діалогового вікна PVC натискаємо кнопку «Combine» (об'єднати) в розділі «Cell Replication» (Реплікація клітинки). Це призведе до об'єднання базової одиничної комірки та повторюваної одиничної комірки, показаної на екрані, у більшу «надкомірку», яка вдвічі перевищує примітивну одиничну комірку. Таким чином тепер наша одинична комірка складається з двох примітивних елементарних комірок (рис.2.12).

Таким чином змінюючи кількість у вікні «Cell Replication» можна створити довгий ланцюг полімера I форми ПВДФ (рис.2.13).

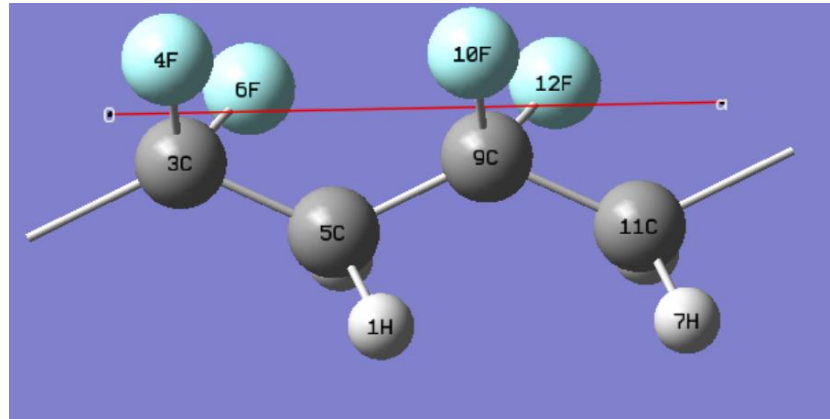


Рис. 2.12 Одинична комірка складена з двох примітивних.

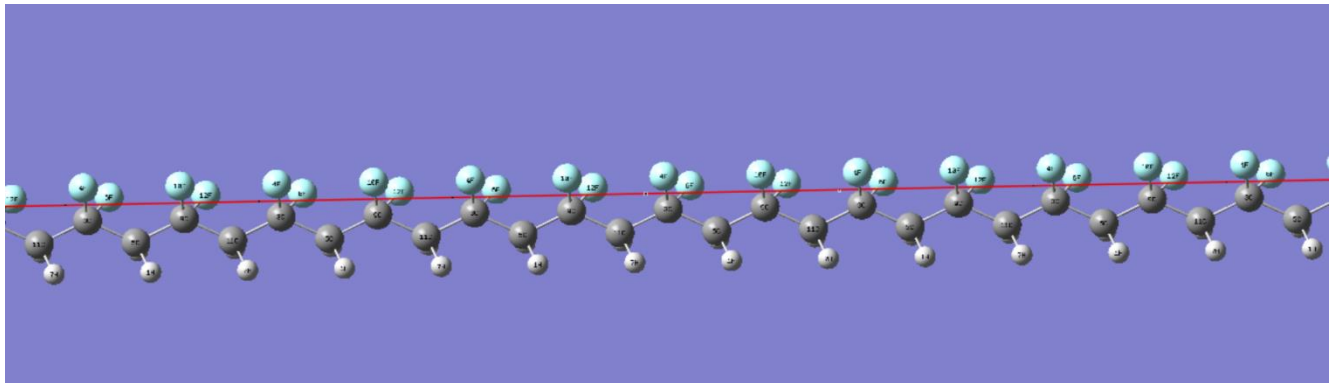


Рис. 2.13 Полімер з $n=14$ ланок I форми (β – фази) ПВДФ.

Але слід зауважити що чим довшим буде ланцюг полімера тим довше програма буде підраховувати необхідні дані, і якщо для ланцюга з $n=6$ енергія буде рахуватися 13 хвилин то для ланцюга з $n=100$ це може зайняти набагато більше часу.

2.3 Методи дослідження

Перед тим як продовжувати дослідження збудованого полімера нам необхідно переконатися в тому що збудований нами полімер дійсно відповідає І формі ПВДФ.

Найпростіший вид роботи який ми можемо порахувати за допомогою квантово-хімічного пакету Gaussian09 це порахувати енергію змодельованого полімера.

З попереднього дослідження [23] ми знаємо що розрахувати енергію в Gaussian09 можна декількома методами: методи теорії функціонала щільності (DFT), Гартрі-Фока (HF), зв'язаних кластерів (CC метод), взаємодії квадратичної конфігурації (QCI метод) та Меллера-Плессета (MPn).

Метод HF у квантовій механіці — це метод розв'язання рівняння Шредінгера, в якому багаточастинкова задача розглядається як задача однієї частинки в припущенні, що кожна частинка рухається в усередненому самоузгодженому полі, створеному іншими частинками системи [16].

Метод ефективний для забезпечення початкових прогнозів першого рівня для багатьох систем, який досить добре розраховує структури та частоти коливань стабільних молекул і деяких перехідних станів. Однак нехтування електронною кореляцією робить її непридатною, наприклад, для точного моделювання енергій реакцій та дисоціації зв'язків.

Теорія MP — це підхід до електронного кореляційного обліку, який полягає у врахуванні вищих збуджених станів за методом ВЧ та використання багаточасткової теорії збурень. Теорія збурень другого порядку (метод MP2) значно покращує розрахунок енергії Хартрі-Фока і завжди призводить до зменшення

повної енергії. Однак облік вищих рівнів може призвести до збільшення енергії і навіть її переоцінки, що є наслідком неврахування принципу варіації [24].

Загалом, чим складніша електронна структура системи, тим вищий рівень (порядок) теорії MP вимагає її точного моделювання. Використання MP2 високого порядку доступне у випадках, коли результати MP2 другого порядку є неправильними. На практиці широко використовується лише MP4 (четвертого порядку), MP3 (третього порядку) зазвичай недостатньо для обробки випадків, коли MP2 працює погано, він рідко пропонує покращення порівняно з MP2, порівнянними з його додатковими обчислювальними витратами. MP5 (п'ятого порядку) також є методом причин, подібним до MP3, а також значними витратами на обчислення.

Метод CC по суті ґрунтується на базовому методі молекулярної орбіти Гартрі-Фока і будує багатоелектронні хвильові функції з використанням експоненційного кластерного оператора для врахування електронної кореляції [25]. Метод CC і метод QCІ дуже схожі і забезпечують точність більше, ніж MP4, ітераційно включають ефекти одинарних і подвійних замінів, ефективно додаючи терміни вище порядку MP4.

Коли ми говоримо про «точні» геометрії, то зазвичай мають на увазі довжини зв'язків в діапазоні приблизно $0,01 - 0,02 \text{ \AA}$ з експерименту, а кути з'єднання і двогранні кути в діапазоні приблизно $1 - 2^\circ$ від експериментально виміряного значення (з нижньою межею обидва діапазони краці).

Використовуючи теорію DFT, можна знайти характеристики багатоелектронної системи за допомогою просторово-залежних функціоналів електронної густини. Таким чином, електронна структура оцінюється за допомогою потенціалу, що діє на електрони системи, і будується як сума зовнішніх потенціалів

V_{ext} , яка визначається виключно структурою та елементним складом системи, та ефективним потенціалом V_{eff} , який представляє міжелектронні взаємодії.

Таким чином, проблему репрезентативної комірки матеріалу з n електронами можна описати як набір з n одноелектронних рівнянь Шредінгера, також відомий як рівняння Кона-Шема [26]. В останні роки набувають популярності методи, засновані на теорії ДПФ. Найкращі методи DFT досягають набагато більшої точності, ніж теорія HF, лише при незначному збільшенні споживання ресурсів методу (набагато менше, ніж MP2 для середніх і великих молекулярних систем).

Методи DFT обчислюють кореляцію електронів через загальні функціонали електронної густини. Функціонали DFT поділяють електронну енергію на кілька компонентів, які обчислюються окремо: кінетична енергія, електронно-ядерна взаємодія, кулоновське відштовхування та обмін (з урахуванням залишку електрон-електронної взаємодії та ділиться на кореляційні та обмінні складові).

Пакет Gaussian містить широкий спектр таких функцій. Це, наприклад, локальні обмінні та кореляційні функціонали, які включають лише спінову електронну густину. Функції, скориговані для обох градієнтів (нелокальних функціоналів), включають значення щільності як спіна електронів, так і їх градієнтів. Існує також кілька гібридних функціоналів, які визначають функціонал обміну як лінійну комбінацію HF, локальних та градієнтно-коригованих умов обміну; цей функціонал обміну потім поєднується з локальним та/або скоригованим градієнтним кореляційним функціоналом.

В ході дослідження [23] були порівняні результати розрахунків проведених всіма вищезазначеними методами і порівняні з експериментальними значеннями [27], внаслідок чого було зроблено заключення про те що метод DFT найбільше підходить для досліджень подібного типу.

Через те що в минулому дослідженні вивчалась енергія лише одного мономера то слід порівняти енергію нашого збудованого полімеру з експериментальними даними. Для цього було обрано полімер з шести ланок ($n = 6$), частина отриманих результатів представлена на рис. 18, короткий результат у вигляді табл.2.1, повний результат представлений в додатку А.

Stoichiometry C12H12F12

Framework group C1[X(C12H12F12)]

IErr= 0 Err= 9.90D-11 NSaved= 5 NIter= 117 NITot= 123.

PS= 192.0000000000002 PSN= 192.000000000000 RNE=
192.000000000000 Err=-2.96D-16

SCF Done: E(RPBE-PBE) = -1648.08233478 A.U. after 15 cycles

Convg = 0.2809D-07 -V/T = 1.9913

Рис. 2.14 Результати обчислення енергії.

Розшифровуючи ці результати ми бачимо що для $C_{12}H_{12}F_{12}$ значення енергії дорівнює $E(RPBE - PBE) = -1648.08233478 \text{ Ha}$. Таким чином для мономера $C_2H_2F_2$ це значення енергії дорівнює:

$$E = -1648.08233478/6 = -274,68 \text{ Ha} \quad (2.2)$$

Таблиця 2.1 – Короткий результат обчислення енергії ПВДФ

Title Card Required		
File Name	alltrans1	
File Type	.chk	
Calculation Type	SP	
Calculation Method	RPBEPBE	
Basis Set	3-21G/AUTO	
Charge	0	
Spin	Singlet	
Total Energy	-1648.08233478	a.u.
RMS Gradient Norm	0.00000000	a.u.

Порівнюючи ці данні з експериментальними даними [27]:

$$E_{exp} = -276,53 \text{ Ha} \quad (2.3)$$

Порахуємо абсолютну та відносну похибки вимірювання:

$$\Delta = E - E_{exp} = -274,68 - (-276,53) = 1,85 \text{ Ha} \quad (2.4)$$

$$\varepsilon = \frac{\Delta}{E_{exp}} \cdot 100\% = \frac{1,85}{276,53} \cdot 100\% = 0,007 \cdot 100\% = 0,7\% \quad (2.5)$$

Таким чином ми бачимо що похибка достатньо мала, а отже цей метод дійсно можна вважати доцільним для аналізу структури подібної до ПВДФ.

2.4 Розрахунки

Починаючи послідження збудованого полімера слід з оптимізації - це процедура, яка обчислює хвильову функцію та енергію для початкової геометрії молекули, після чого переходить до пошуку нової геометрії з більш низькою енергією. Вона повторюється доти, поки не знайде геометрію з найнижчою енергією. Процедура обчислює сумарні сили на кожен атом і оцінює градієнт) енергії атомних положень. Далі на кожному кроці використовує складні алгоритми для вибору нової геометрії, які спрямовані на швидке наближення до геометрії з найменшою енергією. Таким чином, геометрія мінімальної енергії на кожен атом дорівнює нулю. Ця процедура не обов'язково відшукає глобальний мінімум, тобто геометрію з найменшою енергією. Такий послідовний пошук мінімуму знаходить локальний мінімум, але локальний мінімум обов'язково буде глобальним. Процедура оптимізації завершується, коли вона знаходить нерухому точку - де дія сили на атом дорівнює нулю, але це може бути точкою сідла (перехідною структурою). Це може відбуватися, якщо обмежити симетричність молекули і не дозволити програмі шукати повний простір молекулярних ступенів свободи [25]. З цього режиму роботи можна отримати:

- 1) атомні координати оптимізованої молекули;
- 2) оптимізовані параметри – атомні відстані та кути;
- 3) атомні заряди Маллікена (короткі);
- 4) дипольні моменти.

Отже ми порахували оптимізацію для ПВДФ складеного з 6-ти ланок. На рисунку 2.15 зображений полімер до розрахунків а на рисунку 2.16 після його оптимізації.

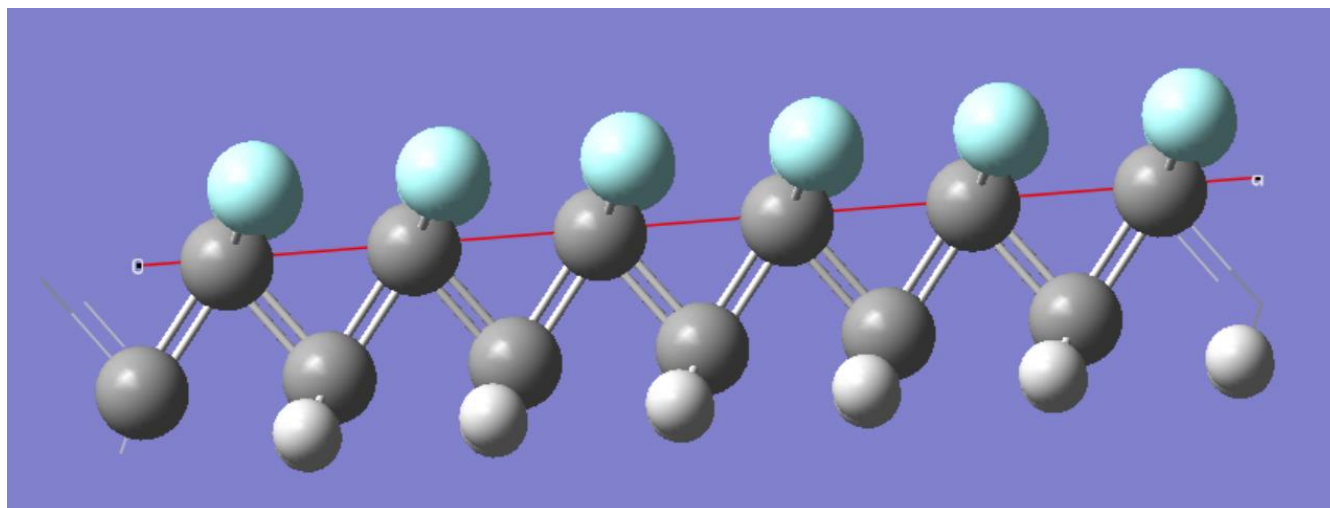


Рис. 2.15 ПВДФ I форми з $n=6$ ланок

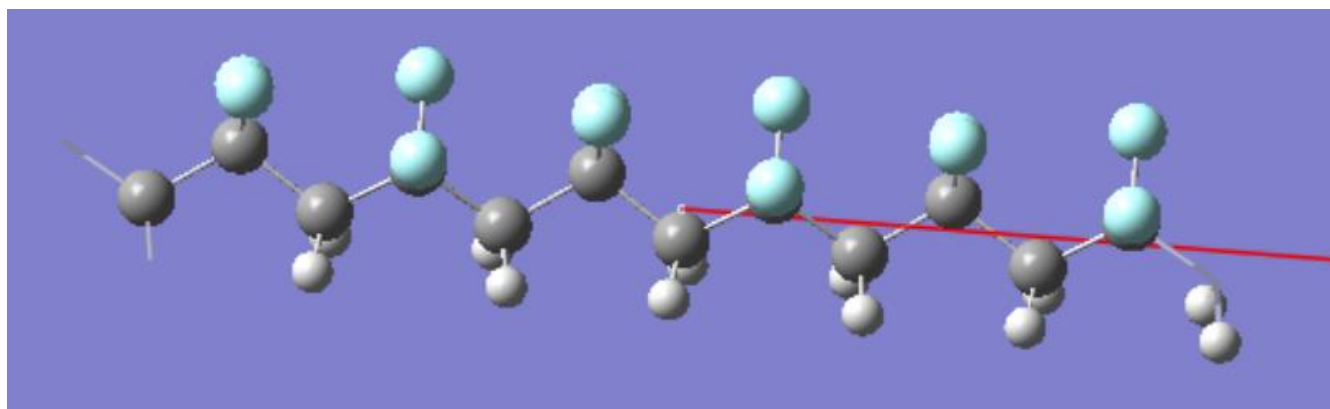


Рис. 2.16 ПВДФ I форми з $n=6$ ланок після оптимізації

Частина результатів оптимізації представлена на рис. 2.17, короткий результат представлений в табл. 2.2, повний результат див. додаток А.

```

Virial Ratio                                R
2.007513592831770E+00
SCF Energy
R      -1.652128184187881E+03
Total Energy
R      -1.652128184187881E+03
RMS Force                                  R
2.599413823613444E-05
RMS Density                                R
4.520569596498116E-08
Length of integer PBC data                 I           60
Integer PBC data                           I      N=       60

```

Рис. 2.17 Уривок з результатів оптимізації І форми ПВДФ

Таблиця 2.2 – Короткий результат після оптимізації

Title Card Required		
File Name	alltrans1opt	
File Type	.chk	
Calculation Type	FOPT	
Calculation Method	RPBEPBE	
Basis Set	3-21G/AUTO	
Charge	0	
Spin	Singlet	
Total Energy	-1652.12818419	a.u.
RMS Gradient Norm	0.00002506	a.u.

З результату розрахунку енергії представленому в табл.2.2 ми можемо провести розрахунки аналогічні розрахункам (2.2-2.5):

$$E = -1652.12818419/6 = -275,35 \text{ Ha} \quad (2.6)$$

$$\Delta = E - E_{exp} = -275,35 - (-276,53) = 1,18 \text{ Ha} \quad (2.7)$$

$$\varepsilon = \frac{\Delta}{E_{exp}} \cdot 100\% = \frac{1,18}{276,53} \cdot 100\% = 0,004 \cdot 100\% = 0,4\% \quad (2.8)$$

З цього ми бачимо що після процедури оптимізації значення енергії наблизилось до експериментального з похибкою в $\varepsilon = 0,4\%$. Отже можна вважати що оптимізація максимально наближає полімер до експериментальних значень.

Також після проведення цих розрахунків можна за допомогою меню «Results» - «Charge Distribution» відкрити діалогове вікно «Відображення атомних зарядів» (рис.2.18(a)). Цей інструмент керує відображенням часткової щільності заряду, обчисленої різними методами Gaussian09. Відображення доступне для заряду Маллікена за замовчуванням але можна обрати й інші заряди, доступні для цього завдання. Заряди Маллікена — це часткові атомні заряди, засновані на молекулярно-орбітальному методі лінійної комбінації атомних орбіталей. Вони залежать від базового набору. Щоб точно розрахувати заряди Маллікена, потрібно використовувати повний базисний набір для молекули, помістивши великий набір функцій на один атом.

Діалогове вікно «Відображення атомних зарядів» використовується для керування тим, які заряди відображаються та як вони відображаються. Вікно посередині показує числові номери зарядів, а праворуч показує атоми, забарвлені зарядом (відображаючи налаштування в діалоговому вікні зліва)(рис. 2.18 (a)).

За замовчуванням колірний спектр для відображення заряду встановлюється шляхом зчитування максимального заряду, обчисленого для молекули, і встановлення діапазону, що відповідає заряду. Діапазон також можна налаштувати вручну, ввівши значення в поля «Charge Range».

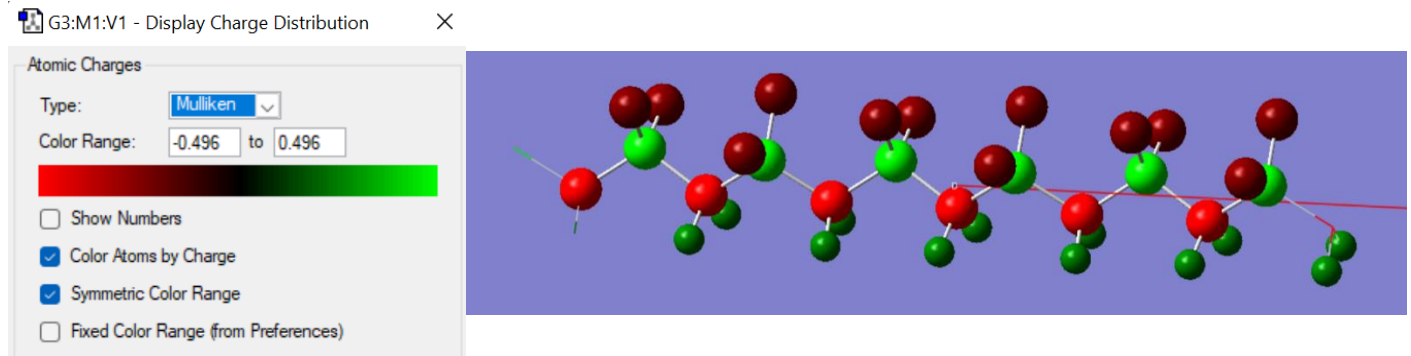


Рис. 2.18 Меню відображення атомних зарядів (а), та саме відображення атомних зарядів для оптимізованого полімера ПВДФ

Також за допомогою вкладки «Surfaces/Contours» меню «Results» можна відкрити діалогове вікно GaussView Surfaces and Contours. Воно дозволяє відображати різні хімічні дані в трьох вимірах. Дані поверхні можуть бути згенеровані з файлу контрольної точки Gaussian(вихідний файл після проведення обчислень) або зчитуватися з файлу куба.

Для початку треба створити файл куба, він створюється на основі електронної густини та інших даних контрольної точки Gaussian. Наприклад можна вибрати матрицю щільності для генерації електростатичного потенціалу, після чого можна побачити такий результат (рис 2.19).

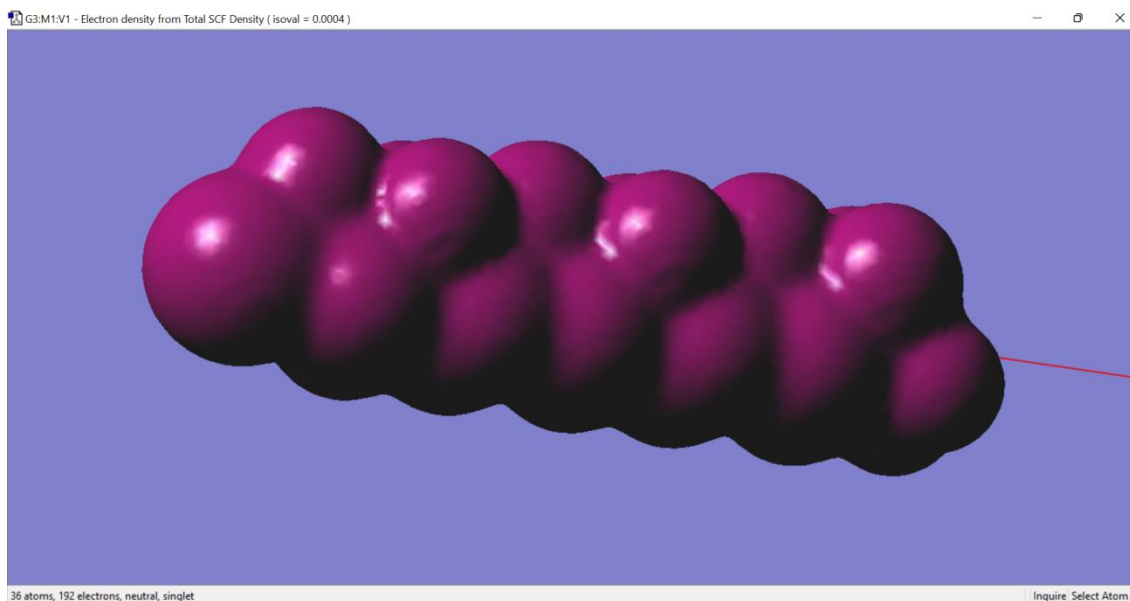


Рис. 2.19 Поверхня щільності електронів для оптимізованого полімера ПВДФ

Для порівняння проведемо таку саму процедуру для не оптимізованого полімера (рис. 2.20).



Рис. 2.20 Поверхня щільності електронів для не оптимізованого полімера ПВДФ

Навіть візуально можна побачити що оптимізований полімер має більш чітку структуру щільності електронів.

Також за допомогою вкладки можна відобразити контури – це двовимірні проєкції даних куба на площину. Вони також використовують згенеровані куби, тож використовуючи той самий куб ми можемо порівняти контури для оптимізованої (рис. 2.21) на не оптимізованої (рис. 2.22) і форми ПВДФ.

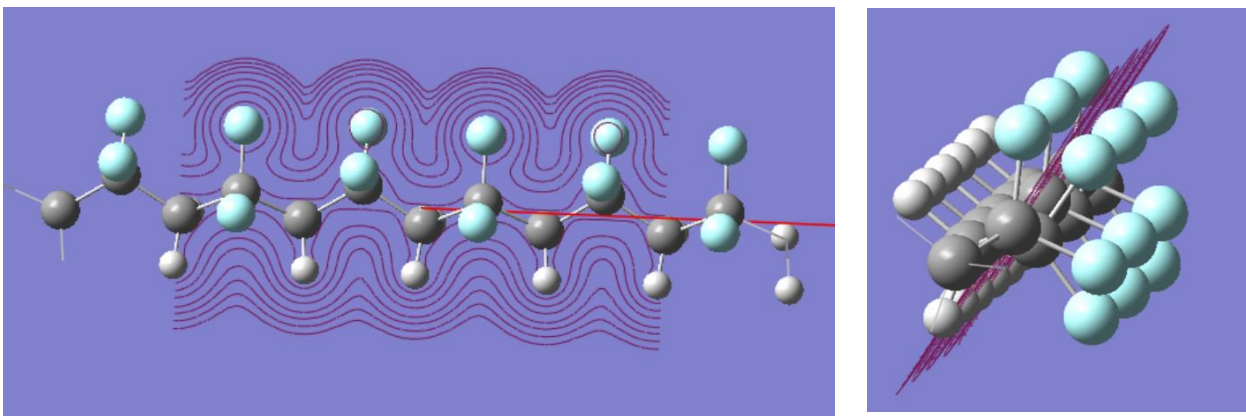


Рис. 2.21 Контури для оптимізованого ПВДФ: вид спереду (а), вид збоку (б)

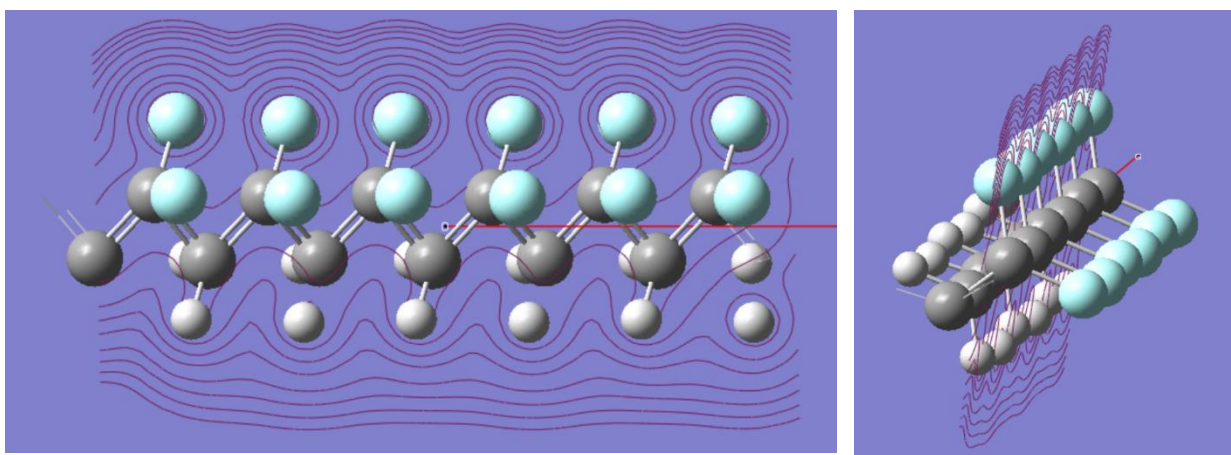


Рис. 2.22 Контури для не оптимізованого ПВДФ: вид спереду (а), вид збоку (б)

Окрім поверхні щільності електронів можна відобразити поверхню молекулярних орбіталей. Для цього потрібно згенерувати новий куб та у вікні «Туре»зі спадного списку обрати Molecular Orbital. Після чого за допомогою того самого алгоритму що і для поверхні густини щільності створити поверхню (рис. 2.23) та її контур (рис. 2.24).

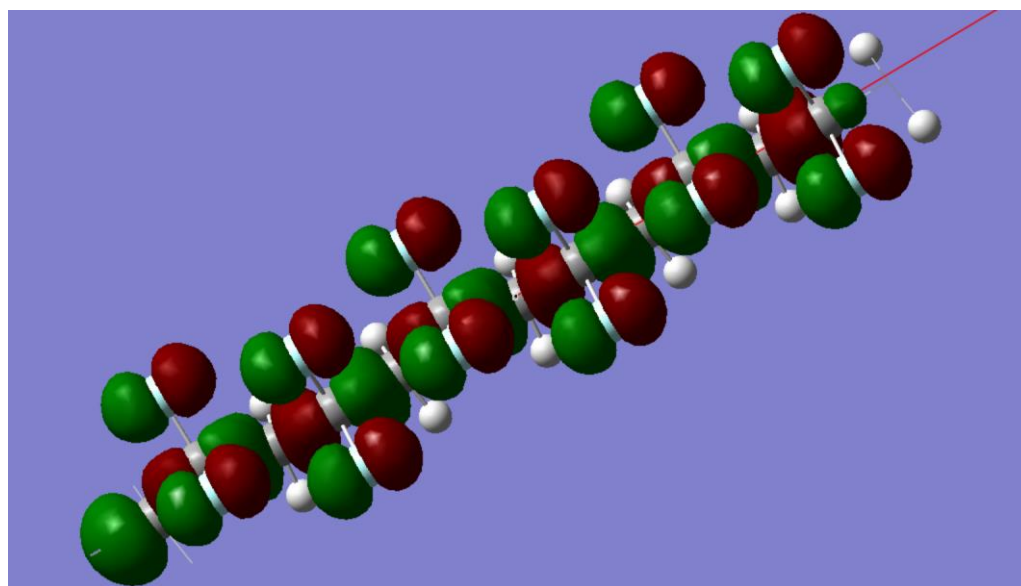


Рис. 2.23 Поверхня молекулярних орбіталей для оптимізованого полімера ПВДФ

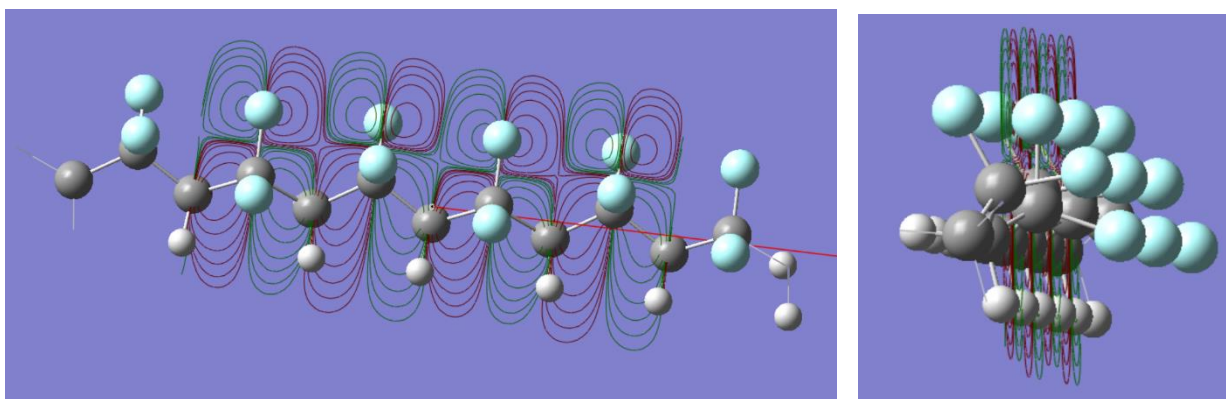


Рис. 2.24 Контурні молекулярних орбіталей для оптимізованого ПВДФ: вид спереду (а), вид збоку (б)

Висновки до розділу 2

В роботі проведено комп'ютерне моделювання β - фази ПВДФ. Доведено що збудована модель відповідає експериментальним даним. Окрім цього було розглянуто методи дослідження зашиті в програмному пакеті Gaussian 09. В результаті порівняння з було доведено, що метод функціонала щільності є найбільш придатним для дослідження даного типу матеріалу через його наближення до експериментальних результатів та швидкість розрахунків. Цим методом було розраховано деякі величини для збудованої форми ПВДФ та порівняно отримані дані.

Також було проведено процедуру оптимізації молекули та наглядно показано переваги оптимізованого полімера перед не оптимізованим.

ВИСНОВКИ

В роботі було розглянуто активні діелектрики, їх види, властивості, застосування, перспективи розвитку та методи дослідження.

За рядом цікавих властивостей та переваг для подальшого дослідження було обрано сегнетоелектричний полімер ПВДФ. Були розглянуті його модифікації та обрано β -фазу (I форму) привабливі характеристики. Для її моделювання та аналізу були обрані пакет візуалізатор GaussView та програмний пакет квантово-хімічних розрахунків Gaussian через їх зручний інтегрований один з одним інтерфейс та потужний функціонал і використання.

Для побудованого полімера були проведені розрахунок енергії та процедура оптимізації методом функціонала щільності.

Було порівняно отримані результати як між собою за швидкістю проведення аналізу, так і з експериментальними даними з дослідження [27].

В результаті проведених порівнянь можна зробити висновок про загальну доцільність досліджень за допомогою Gaussian09, зокрема методом функціоналу щільності, для обраних матеріалів.

У подальшому плануються дослідження інших конформацій ПВДФ з менш відомими властивостями, з метою розширення області застосування матеріалу.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. ACS Applied Materials & Interfaces «Tuning Charge Transport in PVDF-Based Organic Ferroelectric Transistors: Status and Outlook» / [Electronic resource] / Mode of access: <https://www.x-mol.com/paper/1263566272884482048> Pub Date : 2020-05-21
2. Liuxia Ruan, Donghai Zhang, Junwei Tong, Jianli Kang, Yufang Chang, Lianqun Zhou, Gaowu Qin and Xianmin Zhang «Preparation and Device Applications of Ferroelectric β -PVDF Films»/ [Electronic resource] / Mode of access:<https://www.intechopen.com/books/ferroelectrics-and-their-applications/preparation-and-device-applications-of-ferroelectric-pvdf-films> /Published: October 3rd 2018
3. Г. К. Галкіна Н. О. Гордійко «Модельовання β -фази ПВДФ за допомогою Gaussian09» - XX Всеукраїнська науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених- Київ, 2022/ Доступ:<https://drive.google.com/file/d/1oQ0usdfyIzYSc0N-F5ux8cdcvIUUOAIE/view>
4. Поплавко Ю.М, Переверзева Ю.М, Воронов С.О., Якименко Ю.І.\\Фізичне матеріалознавство: Навч. Посіб.\К.: НТУУ «КП» 2007. Ч.2: Діелектрики - 392с.
5. Мікроелектронні сенсорні пристрої магнітного поля / І. А. Большакова, М. Р. Гладун, Р. Л. Голяка, З. Ю. Готра, І. Є. Лопатинський, Є. Потенцкі, Л. І. Сопільник ; ред.: З. Ю. Готра ; Нац. ун-т «Львів. політехніка». — Л. : Вид-во Нац. ун-ту «Львів. політехніка», 2001. — 412 с. — Бібліогр.: 260 назв.
6. Мала гірнича енциклопедія : у 3 т. / за ред. В. С. Білецького. — Д. : Донбас, 2007. — Т. 2 : Л — Р. — 670 с. — ISBN 57740-0828-2

7. Діелектрик // Універсальний словник-енциклопедія. — 4-те вид. — К. : Тека, 2006.
8. Nix, E. L.; Ward, I. M. (1986). "The measurement of the shear piezoelectric coefficients of polyvinylidene fluoride". *Ferroelectrics*. 67: 137–141. doi:10.1080/00150198608245016.
9. Ahmed, Saad; Arrojado, Erika; Sigamani, Nirmal; Ounaies, Zoubeida (14 May 2015). Goulbourne, Nakhiah C. (ed.). "Electric field responsive origami structures using electrostriction-based active materials". *Proceedings of SPIE: Behavior and Mechanics of Multifunctional Materials and Composites 2015*. Behavior and Mechanics of Multifunctional Materials and Composites 2015. Society of Photographic Instrumentation Engineers (SPIE). 9432: 943206. Bibcode:2015SPIE.9432E..06A. doi:10.1117/12.2084785. ISBN 9781628415353. S2CID 120322803
10. Omote, Kenji; Ohigashi, Hiroji; Koga, Keiko (1997). "Temperature dependence of elastic, dielectric, and piezoelectric properties of "single crystalline" films of vinylidene fluoride trifluoroethylene copolymer". *Journal of Applied Physics*. 81 (6): 2760. Bibcode:1997JAP....81.2760O. doi:10.1063/1.364300
11. Lolla, Dinesh; Lolla, Manideep; Abutaleb, Ahmed; Shin, Hyeon U.; Reneker, Darrell H.; Chase, George G. (2016-08-09). "Fabrication, Polarization of Electrospun Polyvinylidene Fluoride Electret Fibers and Effect on Capturing Nanoscale Solid Aerosols". *Materials*. 9 (8): 671. Bibcode:2016Mate....9..671L. doi:10.3390/ma9080671. PMC 5510728. PMID 28773798.
12. H. J. Kawai «The Piezoelectricity of Poly(vinylidene Fluoride)» - *Japanese Journal of Applied Physics* - Vol. 8 – 1969 – 975-976 \http://dx.doi.org/10.1143/JJAP.8.975
13. Yang, Ping-Chang; Mahmood, Tahrin «Western blot: Technique, theory, and trouble shooting» – *North American Journal of Medical Sciences* – 2012 – 4 (9): 429–434\ doi:10.4103/1947-2714.100998.\ ISSN 1947-2714. PMC 3456489. PMID 23050259.

14. Ordoñez, J.; Gago, E. J.; Girard, A. «Processes and technologies for the recycling and recovery of spent lithium-ion batteries» – Renewable and Sustainable Energy Reviews – 2016-07-01 – 60: 195–205 \doi:10.1016/j.rser.2015.12.363. ISSN 1364-0321
15. M. Horanyi, V. Hoxie, D. James, A. Poppe, C. Bryant«THE STUDENT DUST COUNTER ON THE NEW HORIZONS MISSION» - 2016-07-01 – 60: 195–205 – <https://www.boulder.swri.edu/pkb/ssr/ssr-sdc.pdf>
16. Глосарій термінів з хімії / Укладачі Й. Опейда, О.Швайка – 2008 – Донецьк – 738с.
17. Big Chemical Encyclopedia – Mode of access: <https://chempedia.info>
18. Akira Itoh, Yoshiyuki Takahashi, Takeo Furukawa and Hirofumi Yajima«Solid-state calculations of poly(vinylidene fluoride) using the hybrid DFT method: spontaneous polarization of polymorphs» – Polymer Journal – 15 January 2014 – 46, 207–211 – doi:10.1038/pj.
19. Mandal, A.; Nandi, A. K. Ionic Liquid Integrated Multiwalled Carbon Nanotube in a Poly(vinylidene fluoride) Matrix: Formation of a Piezoelectric β -Polymorph with Significant Reinforcement and Conductivity Improvement. ACS Appl. Mater. Interfaces 2013, 5, 747–760, DOI: 10.1021/am302275b
20. Sencadas, V.; Martins, P.; Pitães, A.; Benelmekki, M.; Gómez Ribelles, J. L.; Lanceros-Mendez, S. Influence of Ferrite Nanoparticle Type and Content on the Crystallization Kinetics and Electroactive Phase Nucleation of Poly(Vinylidene Fluoride). Langmuir 2011, 27, 7241–7249, DOI: 10.1021/la2008864
21. Mago, G.; Kalyon, D. M.; Fisher, F. T. Membranes of Polyvinylidene Fluoride and PVDF Nanocomposites with Carbon Nanotubes via Immersion Precipitation. J. Nanomater. 2008, 2008, 1–8, DOI: 10.1155/2008/759825
22. Ochterski J.W. Thermochemistry in Gaussian. – 2000. – Access mode: <http://gaussian.com/thermo/>

23. Г. К. Галкіна Н. О. Гордійко «Розрахунок енергії молекули ПВДФ різними методами за допомогою пакету Gaussian» - XVIII Всеукраїнська науково-практична конференції студентів, аспірантів та молодих вчених- Київ, 2020 / Доступ:<https://drive.google.com/file/d/1BcmU79pwMDtgA7ZXqTd5Gtw6CO6Av1ou/view>
24. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник - 4-те вид., доп.— Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012.— 872 с.
25. Shavitt I., Bartlett R. Many-Body Methods in Chemistry and Physics: MBPT and Coupled-Cluster Theory (Cambridge Molecular Science). — 2009. — Cambridge: Cambridge University Press.
26. Hanaor D. A. H., Assadi M. H. N., Li S., Yu A., Sorrell C. C. Ab initio study of phase stability in doped TiO₂ - Computational Mechanics— 2012. — 50 (2): 185–194.
27. Banerjee D., Ghosh A., Chattopadhyay S., Ghosh P., Chaudhuri R. Revisiting the ‘cis-effect’ in 1,2-difluoro derivatives of ethylene and diazene using ab initio multireference methods — Molecular Physics — 2014. — Mode of access: https://www.researchgate.net/publication/271945985_Revisiting_the_'cis_effect'_in_12difluoro_derivatives_of_ethylene_and_diazene_using_ab_initio_multireference_methods.

ДОДАТОК А

Entering Link 1 = C:\G09W\l1.exe PID= 10628.

Copyright (c) 1988,1990,1992,1993,1995,1998,2003,2009,2010,
Gaussian, Inc. All Rights Reserved.

This is part of the Gaussian(R) 09 program. It is based on the Gaussian(R) 03 system (copyright 2003, Gaussian, Inc.), the Gaussian(R) 98 system (copyright 1998, Gaussian, Inc.), the Gaussian(R) 94 system (copyright 1995, Gaussian, Inc.), the Gaussian 92(TM) system (copyright 1992, Gaussian, Inc.), the Gaussian 90(TM) system (copyright 1990, Gaussian, Inc.), the Gaussian 88(TM) system (copyright 1988, Gaussian, Inc.), the Gaussian 86(TM) system (copyright 1986, Carnegie Mellon University), and the Gaussian 82(TM) system (copyright 1983, Carnegie Mellon University). Gaussian is a federally registered trademark of Gaussian, Inc.

This software contains proprietary and confidential information, including trade secrets, belonging to Gaussian, Inc.

This software is provided under written license and may be used, copied, transmitted, or stored only in accord with that written license.

The following legend is applicable only to US Government contracts under FAR:

RESTRICTED RIGHTS LEGEND

Use, reproduction and disclosure by the US Government is subject to restrictions as set forth in subparagraphs (a) and (c) of the Commercial Computer Software - Restricted Rights clause in FAR 52.227-19.

Gaussian, Inc.
340 Quinnipiac St., Bldg. 40, Wallingford CT 06492

Warning -- This program may not be used in any manner that competes with the business of Gaussian, Inc. or will provide assistance to any competitor of Gaussian, Inc. The licensee of this program is prohibited from giving any competitor of Gaussian, Inc. access to this program. By using this program, the user acknowledges that Gaussian, Inc. is engaged in the business of creating and licensing software in the field of computational chemistry and represents and warrants to the licensee that it is not a competitor of Gaussian, Inc. and that it will not use this program in any manner prohibited above.

Cite this work as:

Gaussian 09, Revision B.01,
M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria,
M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B.
Mennucci,
G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian,
A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada,
M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T.
Nakajima,
Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr.,
J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers,
K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J.
Normand,
K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi,
M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross,
V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann,
O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski,
R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth,

P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels,
O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski,
and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.

Gaussian 09: IA32W-G09RevB.01 12-Aug-2010
12-May-2022

%chk=C:\diploma molec\alltrans1.chk

pbepbe/3-21g/auto

1/38=1/1;
2/12=2,17=6,18=5,40=1/2;
3/5=5,11=2,16=1,25=1,30=1,74=1009,82=28/1,2,3;
4/1;
5/5=2,38=5/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
99/5=1,9=1/99;

Title Card Required

Symbolic Z-matrix:

Charge = 0 Multiplicity = 1

H	2.93212	-1.45048	1.19591
H	3.04875	-1.69902	-0.63586
C	1.58806	-1.10768	0.13401
H	1.29364	-1.46649	1.09811
H	1.41434	-1.70831	-0.7343
C	-0.05726	-1.11301	0.06361
C	0.77188	-0.04543	-0.03322
C	2.41719	-0.0401	0.03718
F	1.14334	0.40727	-1.2496
F	0.99105	0.71237	1.06231
F	2.79555	0.40348	-1.18043
F	2.6484	0.71706	1.13068
H	6.22003	-1.45048	1.19591
H	9.50794	-1.45048	1.19591
H	6.33666	-1.69902	-0.63586
H	9.62457	-1.69902	-0.63586
C	4.87597	-1.10768	0.13401
C	8.16387	-1.10768	0.13401
H	4.58155	-1.46649	1.09811
H	7.86946	-1.46649	1.09811
H	4.70225	-1.70831	-0.7343
H	7.99016	-1.70831	-0.7343
C	3.23065	-1.11301	0.06361
C	6.51856	-1.11301	0.06361
C	4.05978	-0.04543	-0.03322
C	7.34769	-0.04543	-0.03322
C	5.7051	-0.0401	0.03718
C	8.993	-0.0401	0.03718
F	4.43124	0.40727	-1.2496
F	7.71915	0.40727	-1.2496
F	4.27895	0.71237	1.06231
F	7.56686	0.71237	1.06231
F	6.08346	0.40348	-1.18043
F	9.37137	0.40348	-1.18043
F	5.93631	0.71706	1.13068
F	9.22422	0.71706	1.13068
Tv	9.86372	0.	0.

Before rotation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	1	0	2.932125	-1.450475	1.195915
2	1	0	3.048752	-1.699016	-0.635859
3	6	0	1.588057	-1.107681	0.134014

4	1	0	1.293640	-1.466487	1.098108
5	1	0	1.414345	-1.708308	-0.734301
6	6	0	-0.057255	-1.113012	0.063609
7	6	0	0.771875	-0.045430	-0.033224
8	6	0	2.417188	-0.040099	0.037181
9	9	0	1.143336	0.407270	-1.249604
10	9	0	0.991045	0.712370	1.062314
11	9	0	2.795549	0.403480	-1.180432
12	9	0	2.648403	0.717060	1.130685
13	1	0	6.220032	-1.450475	1.195915
14	1	0	9.507940	-1.450475	1.195915
15	1	0	6.336659	-1.699016	-0.635859
16	1	0	9.624567	-1.699016	-0.635859
17	6	0	4.875965	-1.107681	0.134014
18	6	0	8.163873	-1.107681	0.134014
19	1	0	4.581548	-1.466487	1.098108
20	1	0	7.869456	-1.466487	1.098108
21	1	0	4.702253	-1.708308	-0.734301
22	1	0	7.990160	-1.708308	-0.734301
23	6	0	3.230653	-1.113012	0.063609
24	6	0	6.518561	-1.113012	0.063609
25	6	0	4.059783	-0.045430	-0.033224
26	6	0	7.347691	-0.045430	-0.033224
27	6	0	5.705096	-0.040099	0.037181
28	6	0	8.993004	-0.040099	0.037181
29	9	0	4.431244	0.407270	-1.249604
30	9	0	7.719152	0.407270	-1.249604
31	9	0	4.278953	0.712370	1.062314
32	9	0	7.566861	0.712370	1.062314
33	9	0	6.083457	0.403480	-1.180432
34	9	0	9.371365	0.403480	-1.180432
35	9	0	5.936311	0.717060	1.130685
36	9	0	9.224219	0.717060	1.130685
37	-2	0	9.863724	0.000000	0.000000

Lengths of translation vectors: 9.863724

Input orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	1	0	-2.104705	1.449568	0.000000
2	1	0	-1.988078	0.189271	1.352339
3	6	0	-3.448772	0.410641	0.407153
4	1	0	-3.743189	1.384010	0.074329
5	1	0	-3.622485	0.118966	1.421869
6	6	0	-5.094085	0.359528	0.455863
7	6	0	-4.264954	-0.391469	-0.309064
8	6	0	-2.619642	-0.340356	-0.357774
9	9	0	-3.893493	-1.619552	0.110854
10	9	0	-4.045784	-0.023468	-1.589313
11	9	0	-2.241280	-1.563617	0.069983
12	9	0	-2.388427	0.026477	-1.636239
13	1	0	1.183203	1.449568	0.000000
14	1	0	4.471111	1.449568	0.000000
15	1	0	1.299830	0.189271	1.352339
16	1	0	4.587738	0.189271	1.352339
17	6	0	-0.160864	0.410641	0.407153
18	6	0	3.127043	0.410641	0.407153
19	1	0	-0.455281	1.384010	0.074329
20	1	0	2.832626	1.384010	0.074329
21	1	0	-0.334577	0.118966	1.421869
22	1	0	2.953331	0.118966	1.421869
23	6	0	-1.806177	0.359528	0.455863
24	6	0	1.481731	0.359528	0.455863
25	6	0	-0.977046	-0.391469	-0.309064
26	6	0	2.310862	-0.391469	-0.309064
27	6	0	0.668266	-0.340356	-0.357774
28	6	0	3.956174	-0.340356	-0.357774
29	9	0	-0.605586	-1.619552	0.110854
30	9	0	2.682322	-1.619552	0.110854
31	9	0	-0.757876	-0.023468	-1.589313

32	9	0	2.530032	-0.023468	-1.589313
33	9	0	1.046628	-1.563617	0.069983
34	9	0	4.334535	-1.563617	0.069983
35	9	0	0.899481	0.026477	-1.636239
36	9	0	4.187389	0.026477	-1.636239
37	-2	0	9.863724	0.000000	0.000000

Lengths of translation vectors: 9.863724

Distance matrix (angstroms):

	1	2	3	4	5
1 H	0.000000				
2 H	1.852234	0.000000			
3 C	1.746900	1.753856	0.000000		
4 H	1.641479	2.478130	1.070000	0.000000	
5 H	2.468981	1.637395	1.070000	1.852234	0.000000
6 C	3.214403	3.237273	1.646827	1.737829	1.776695
7 C	2.855103	2.877791	1.350000	1.889856	1.915578
8 C	1.896573	1.898384	1.355200	2.102977	2.093753
9 F	3.554089	2.905810	2.099346	3.007542	2.194231
10 F	2.909216	3.596211	2.128556	2.200060	3.044124
11 F	3.017090	2.186587	2.338678	3.308210	2.562500
12 F	2.186998	3.019665	2.333959	2.569887	3.299012
13 H	3.287908	3.670721	4.764487	4.927389	5.185253
14 H	6.575816	6.718503	7.998106	8.214898	8.324572
15 H	3.874019	3.287908	4.846814	5.337861	4.923308
16 H	6.943051	6.575816	8.094929	8.512641	8.210818
17 C	2.241352	2.069080	3.287908	3.727099	3.619052
18 C	5.349424	5.206424	6.575816	6.946821	6.831607
19 H	1.652398	2.325979	3.165313	3.287908	3.667067
20 H	4.938326	5.128343	6.365076	6.575816	6.714511
21 H	2.631647	1.656455	3.288303	3.877478	3.287908
22 H	5.419958	4.942398	6.488578	6.946912	6.575816
23 C	1.218654	0.930454	1.644112	2.224219	2.071235
24 C	3.776046	3.587789	4.931009	5.338064	5.200390
25 C	2.180952	2.029705	2.695511	3.309209	3.202346
26 C	4.793972	4.645256	5.859158	6.320669	6.201715
27 C	3.319819	3.203304	4.254306	4.756163	4.667831
28 C	6.329777	6.207989	7.482135	7.901921	7.798344
29 F	3.417476	2.593147	3.506164	4.343648	3.720603
30 F	5.687479	5.160016	6.456276	7.092949	6.670217
31 F	2.551411	3.195618	3.378646	3.696051	4.158544
32 F	5.116301	5.395544	6.318261	6.640934	6.851348
33 F	4.360628	3.731821	4.921382	5.624133	5.143860
34 F	7.109711	6.685244	8.036869	8.598730	8.244565
35 F	3.705077	4.158858	4.819786	5.130627	5.459740
36 F	6.655292	6.862543	7.914164	8.225753	8.387772
37 TV	12.055892	11.930207	13.325050	13.677320	13.561478
	6	7	8	9	10
6 C	0.000000				
7 C	1.355200	0.000000			
8 C	2.697167	1.646827	0.000000		
9 F	2.340343	1.350000	1.865114	0.000000	
10 F	2.329885	1.350000	1.910756	2.336931	0.000000
11 F	3.462063	2.369148	1.350000	1.653665	2.895092
12 F	3.436335	2.336114	1.350000	2.833191	1.658774
13 H	6.387514	5.759110	4.218229	5.933349	5.660217
14 H	9.637892	8.933296	7.321926	8.910577	8.788245
15 H	6.458700	5.836466	4.308973	5.637706	6.105257
16 H	9.724729	9.025944	7.426393	8.760389	9.123392
17 C	4.933725	4.242629	2.682293	4.259342	4.389411
18 C	8.221431	7.469804	5.845811	7.314193	7.458135
19 H	4.765882	4.220536	2.800823	4.565525	4.200049
20 H	8.001742	7.326320	5.734752	7.366370	7.215347
21 H	4.862505	4.324874	2.932512	4.172181	4.781273
22 H	8.108757	7.440451	5.868231	7.184721	7.620703
23 C	3.287908	2.682293	1.346688	2.897012	3.057004
24 C	6.575816	5.845811	4.239470	5.738364	5.906171
25 C	4.254305	3.287908	1.644112	3.192206	3.345387
26 C	7.482135	6.575816	4.931009	6.338654	6.494722
27 C	5.861444	4.933725	3.287908	4.760841	4.882558
28 C	9.113672	8.221431	6.575816	7.967009	8.102373


```

10 F 2.329885 1.350000 1.910756 2.336931 0.000000
11 F 3.462063 2.369148 1.350000 1.653665 2.895092
12 F 3.436335 2.336114 1.350000 2.833191 1.658774
13 H 3.776046 4.793972 6.329777 5.687479 5.116301
14 H 1.218654 2.180952 3.319819 3.417476 2.551411
15 H 3.587789 4.645256 6.207989 5.160016 5.395544
16 H 0.930454 2.029705 3.203304 2.593147 3.195618
17 C 4.933725 4.242629 2.682293 4.259342 4.389411
18 C 1.644112 2.695511 4.254306 3.506164 3.378646
19 H 4.765882 4.220536 2.800823 4.565525 4.200049
20 H 2.224219 3.309209 4.756163 4.343648 2.696051
21 H 4.862505 4.324874 2.932512 4.172181 4.781273
22 H 2.071235 3.202346 4.667831 3.720603 4.158544
23 C 3.287908 2.682293 1.346688 2.897012 3.057004
24 C 3.287908 4.254305 5.861444 4.917562 4.809588
25 C 4.254305 3.287908 1.644112 3.192206 3.345387
26 C 2.682293 3.287908 4.933725 3.882718 3.751541
27 C 4.239470 4.931009 6.575816 5.474192 5.304361
28 C 1.346688 1.644112 3.287908 2.431538 2.254613
29 F 4.917562 3.882718 2.431538 3.287908 4.156082
30 F 2.897012 3.192206 4.760841 3.287908 3.907704
31 F 4.809588 3.751541 2.254613 3.907704 3.287908
32 F 3.057004 3.345387 4.882558 4.156082 3.287908
33 F 4.208112 4.715888 6.331491 4.924090 5.281169
34 F 2.009155 1.765189 3.185091 1.637161 2.706624
35 F 4.412021 4.900957 6.482515 5.610191 4.918936
36 F 2.197004 1.981935 3.333528 2.990028 1.631990
  11 12 13 14 15
11 F 0.000000
12 F 2.336931 0.000000
13 H 7.109711 6.655292 0.000000
14 H 4.360628 3.705077 3.287908 0.000000
15 H 6.685244 6.862543 1.852234 3.670721 0.000000
16 H 3.731821 4.158858 3.874019 1.852234 3.287908
17 C 2.887821 3.047140 8.592420 5.349424 8.458917
18 C 4.921382 4.819786 2.241352 1.746900 2.069080
19 H 3.446493 2.916503 8.225836 4.938326 8.295198
20 H 5.624133 5.130627 1.652398 1.641479 2.325979
21 H 2.879965 3.684953 8.570122 5.419958 8.229911
22 H 5.143860 5.459740 2.631647 2.468981 1.656455
23 C 2.009155 2.197004 6.975142 3.776046 6.819047
24 C 6.446374 6.356937 1.218654 3.214403 0.930454
25 C 1.765189 1.981935 7.926440 4.793972 7.788310
26 C 5.452569 5.348595 2.180952 2.855103 2.029705
27 C 7.073890 6.935756 1.896573 4.218229 1.898384
28 C 3.888557 3.762083 3.319819 1.896573 3.203304
29 F 1.637161 2.990028 8.639234 5.687479 8.255168
30 F 4.940607 5.360443 3.417476 3.554089 2.593147
31 F 2.706624 1.631990 8.213650 5.116301 8.344608
32 F 5.572969 4.945740 2.551411 2.909216 3.195618
33 F 6.575816 6.838668 3.017090 4.561936 2.186587
34 F 3.287908 3.912030 4.360628 3.017090 3.731821
35 F 7.116025 6.575816 2.186998 4.178397 3.019665
36 F 4.152010 3.287908 3.705077 2.186998 4.158858
  16 17 18 19 20
16 H 0.000000
17 C 5.206424 0.000000
18 C 1.753856 6.575816 0.000000
19 H 5.128343 1.070000 6.365076 0.000000
20 H 2.478130 6.946821 1.070000 6.575816 0.000000
21 H 4.942398 1.070000 6.488579 1.852234 6.946912
22 H 1.637395 6.831607 1.070000 6.714511 1.852234
23 C 3.587789 1.646827 4.931009 1.737829 5.338064
24 C 3.237273 8.221431 1.646827 8.001742 1.737829
25 C 4.645256 1.350000 5.859158 1.889856 6.320669
26 C 2.877791 7.469804 1.350000 7.326320 1.889856
27 C 4.308973 9.097966 2.682293 8.919127 2.800823
28 C 1.898384 5.845811 1.355200 5.734752 2.102977
29 F 5.160016 2.099346 6.465276 3.007542 7.092949
30 F 2.905810 7.314193 2.099346 7.366370 3.007542
31 F 5.395544 2.128556 6.318261 2.200060 6.640934
32 F 3.596211 7.458135 2.128556 7.215347 2.200060
33 F 4.154096 8.884916 2.887821 8.866142 3.446493
34 F 2.186587 5.729771 2.338678 5.867968 3.308210
35 F 4.749877 9.045579 3.047140 8.784723 2.916503
36 F 3.019665 5.894357 2.333959 5.659358 2.569887
  21 22 23 24 25
21 H 0.000000
22 H 6.575816 0.000000
23 C 1.776695 5.200390 0.000000
24 C 8.108757 1.776695 6.575816 0.000000
25 C 1.915578 6.201715 1.355200 7.482135 0.000000
26 C 7.440451 1.915578 5.845811 1.355200 6.575816
27 C 9.049492 2.932512 7.466814 1.346688 8.218715
28 C 5.868231 2.093753 4.239470 2.697167 4.931009
29 F 2.194231 6.670217 2.340343 8.031706 1.350000
30 F 7.184721 2.194231 5.738364 2.340343 6.338654
31 F 3.044124 6.851348 2.329885 7.902948 1.350000
32 F 7.620703 3.044124 5.906171 2.329885 6.494722
33 F 8.752817 2.879965 7.280136 2.009155 7.936245
34 F 5.625181 2.562500 4.208112 3.462063 4.715888
35 F 9.155965 3.684953 7.464966 2.197004 8.107489
36 F 6.155888 3.299012 4.412021 3.436335 4.900957
  26 27 28 29 30
26 C 0.000000
27 C 1.644112 0.000000
28 C 1.646827 3.287908 0.000000
29 F 7.067473 8.697233 5.474192 0.000000
30 F 1.350000 2.431538 1.865114 6.575816 0.000000
31 F 6.924326 8.532871 5.304361 2.336931 6.833720
32 F 1.350000 2.254613 1.910756 7.120777 2.336931
33 F 1.765189 1.350000 3.185091 8.211803 1.637161
34 F 2.369148 3.888557 1.350000 4.924090 1.653665
35 F 1.981935 1.350000 3.333528 8.696487 2.990028
36 F 2.336114 3.762083 1.350000 5.610191 2.833191
  31 32 33 34 35
31 F 0.000000
32 F 6.575816 0.000000
33 F 8.371162 2.706624 0.000000
34 F 5.281169 2.895092 3.287908 0.000000
35 F 8.206652 1.631990 2.336931 4.152010 0.000000
36 F 4.918936 1.658774 3.912030 2.336931 3.287908
  36
36 F 0.000000
Symmetry turned off:
Cannot cope with ghost atoms or with translation vectors.
Stoichiometry C12H12F12
Framework group C1[X(C12H12F12)]
Deg. of freedom 102
Full point group C1 NOp 1
Standard basis: 3-21G (6D, 7F)
Integral buffers will be 262144 words long.
Raffenetti 2 integral format.
Two-electron integral symmetry is turned off.
240 basis functions, 396 primitive gaussians, 240 cartesian
basis functions
96 alpha electrons 96 beta electrons
nuclear repulsion energy 3090.5039017436 Hartrees.
NAtoms= 36 NActive= 36 NUniq= 36 SFac= 1.00D+00
NAtFMM= 50 NAOKFM=F Big=F
Standard density basis: Auto (5D, 7F)
744 Density fitting functions
FOutLm= 100.00.
Periodicity: 1 0 0
Max integer dimensions: 6 0 0
PBC vector 1 X= 18.6397 Y= 0.0000 Z= 0.0000
Recp vector 1 X= 0.0536 Y= 0.0000 Z= 0.0000
Generated k point mesh (from -Pi to Pi):
K space mesh: X= 68 Y= 0 Z= 0
A half-cell shift: 0
Using k point mesh (from -Pi to Pi):
K space mesh: X= 68 Y= 0 Z= 0
A half-cell shift: 0
CountK=T Total number of k points: 0
CountK=T Total number of k points: 35
One-electron integrals computed using PRISM.

```

NBasis= 240 RedAO= T NBF= 240
 NBsUse= 240 1.00D-06 NBFU= 240
 NBasis= 240 NBas6D= 240 NTT= 28920 NTT6D= 28920
 NDBShl= 168 NDBF= 744 NDBF6D= 816 NNucDB= 0
 IDenFi= 4 ISolve= 4 FullAP=F BlkAPC=T NucTyp= 0
 TolInv= 1.00D-06 TolIt= 1.00D-10 IR12=0.
 MaxSav= 6 NSavIt= 745 MaxIt= 1000.
 Symmetry not used in FoFDir.
 MinBra= 0 MaxBra= 2 Meth= 1.
 IRaf= 0 NMat= 1 IRICut= 1 DoRegI=T DoRafI=F
 ISym2E= 0 JSym2E=0.
 RepCel: MaxNCR= 11 NCIRep= 11 NMTpBC= 11.
 Harris functional with IExCor= 1009 diagonalized for initial guess.
 RepCel: MaxNCR= 11 NCIRep= 11 NMTpBC= 11.
 HarFok: IExCor= 1009 AccDes= 0.00D+00 IRadAn= 0
 IDoV= 2
 ScaDFX= 1.000000 1.000000 1.000000 1.000000
 FoFCou: FMM=T IPFlag= 524288 FMFlag= 990000
 FMFlg1= 1001
 NFXFlg= 0 DoJe=T BraDBF=F KetDBF=T FulRan=T
 Omega= 0.000000 0.000000 1.000000 0.000000 0.000000
 ICntrl= 500 IOpCl= 0
 NMat0= 1 NMatS0= 1 NMatT0= 0 NMatD0= 1
 NMTDS0= 0 NMTDT0= 0
 IICent= 4 NGrid= 0.
 Symmetry not used in FoFCou.
 FMM levels: 3 Number of levels for PrismC: 2

----- ATTENTION-----
 Total charge is not ZERO --- -0.000000000373
 ----- ATTENTION-----

Requested convergence on RMS density matrix=1.00D-07 within 128 cycles.
 Requested convergence on MAX density matrix=1.00D-05.
 Requested convergence on energy=1.00D-05.
 No special actions if energy rises.
 Diagonalized old Fock matrix for initial guess.
 FoFCou: FMM=T IPFlag= 0 FMFlag= 990000 FMFlg1= 1001
 NFXFlg= 0 DoJe=T BraDBF=T KetDBF=F FulRan=T
 Omega= 0.000000 0.000000 1.000000 0.000000 0.000000
 ICntrl= 500 IOpCl= 0
 NMat0= 1 NMatS0= 1 NMatT0= 0 NMatD0= 1
 NMTDS0= 0 NMTDT0= 0
 IICent= 5 NGrid= 0.
 Symmetry not used in FoFCou.
 FMM levels: 3 Number of levels for PrismC: 2
 ItDFit: ISolve= 4 NSavIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax= 1000 IStorA=2
 Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.59D+03 BPNorm= 6.93D+01
 Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10
 Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL= 744 KMP= 744

Iter	Natral	Err Est	Error Estimate
ISDGMR: 0	0.8970992D+00	0.8970992D+00	
ISDGMR: 1	0.2797169D+00	0.2797169D+00	
ISDGMR: 2	0.1145299D+00	0.1145299D+00	
ISDGMR: 3	0.5675085D-01	0.5675085D-01	
ISDGMR: 4	0.3181664D-01	0.3181664D-01	
ISDGMR: 5	0.1288235D-01	0.1288235D-01	
ISDGMR: 6	0.9700815D-02	0.9700815D-02	
ISDGMR: 7	0.7593772D-02	0.7593772D-02	
ISDGMR: 8	0.6438925D-02	0.6438925D-02	
ISDGMR: 9	0.5407525D-02	0.5407525D-02	
ISDGMR: 10	0.4654459D-02	0.4654459D-02	
ISDGMR: 11	0.4266448D-02	0.4266448D-02	
ISDGMR: 12	0.3602750D-02	0.3602750D-02	
ISDGMR: 13	0.3090648D-02	0.3090648D-02	
ISDGMR: 14	0.2813957D-02	0.2813957D-02	

ISDGMR: 15	0.2712144D-02	0.2712144D-02
ISDGMR: 16	0.2677479D-02	0.2677479D-02
ISDGMR: 17	0.2583932D-02	0.2583932D-02
ISDGMR: 18	0.2290538D-02	0.2290538D-02
ISDGMR: 19	0.2005259D-02	0.2005259D-02
ISDGMR: 20	0.1742864D-02	0.1742864D-02
ISDGMR: 21	0.1615364D-02	0.1615364D-02
ISDGMR: 22	0.1504021D-02	0.1504021D-02
ISDGMR: 23	0.1310969D-02	0.1310969D-02
ISDGMR: 24	0.1211837D-02	0.1211837D-02
ISDGMR: 25	0.1130256D-02	0.1130256D-02
ISDGMR: 26	0.1038979D-02	0.1038979D-02
ISDGMR: 27	0.9619979D-03	0.9619979D-03
ISDGMR: 28	0.8901602D-03	0.8901602D-03
ISDGMR: 29	0.8310565D-03	0.8310565D-03
ISDGMR: 30	0.7476826D-03	0.7476826D-03
ISDGMR: 31	0.6815934D-03	0.6815934D-03
ISDGMR: 32	0.5914914D-03	0.5914914D-03
ISDGMR: 33	0.5510011D-03	0.5510011D-03
ISDGMR: 34	0.5280810D-03	0.5280810D-03
ISDGMR: 35	0.5042721D-03	0.5042721D-03
ISDGMR: 36	0.4774713D-03	0.4774713D-03
ISDGMR: 37	0.4402979D-03	0.4402979D-03
ISDGMR: 38	0.3971059D-03	0.3971059D-03
ISDGMR: 39	0.3753626D-03	0.3753626D-03
ISDGMR: 40	0.3599159D-03	0.3599159D-03
ISDGMR: 41	0.3477699D-03	0.3477699D-03
ISDGMR: 42	0.3152251D-03	0.3152251D-03
ISDGMR: 43	0.2439026D-03	0.2439026D-03
ISDGMR: 44	0.2185608D-03	0.2185608D-03
ISDGMR: 45	0.2030186D-03	0.2030186D-03
ISDGMR: 46	0.1895248D-03	0.1895248D-03
ISDGMR: 47	0.1819031D-03	0.1819031D-03
ISDGMR: 48	0.1767117D-03	0.1767117D-03
ISDGMR: 49	0.1681094D-03	0.1681094D-03
ISDGMR: 50	0.1616591D-03	0.1616591D-03
ISDGMR: 51	0.1541896D-03	0.1541896D-03
ISDGMR: 52	0.1405914D-03	0.1405914D-03
ISDGMR: 53	0.1322894D-03	0.1322894D-03
ISDGMR: 54	0.1212617D-03	0.1212617D-03
ISDGMR: 55	0.1052929D-03	0.1052929D-03
ISDGMR: 56	0.9592154D-04	0.9592154D-04
ISDGMR: 57	0.8646233D-04	0.8646233D-04
ISDGMR: 58	0.7966893D-04	0.7966893D-04
ISDGMR: 59	0.7571002D-04	0.7571002D-04
ISDGMR: 60	0.7040021D-04	0.7040021D-04
ISDGMR: 61	0.6603545D-04	0.6603545D-04
ISDGMR: 62	0.6112807D-04	0.6112807D-04
ISDGMR: 63	0.5671069D-04	0.5671069D-04
ISDGMR: 64	0.5359140D-04	0.5359140D-04
ISDGMR: 65	0.5044629D-04	0.5044629D-04
ISDGMR: 66	0.4721057D-04	0.4721057D-04
ISDGMR: 67	0.4611584D-04	0.4611584D-04
ISDGMR: 68	0.4515699D-04	0.4515699D-04
ISDGMR: 69	0.4351824D-04	0.4351824D-04
ISDGMR: 70	0.4043187D-04	0.4043187D-04
ISDGMR: 71	0.3865217D-04	0.3865217D-04
ISDGMR: 72	0.3842358D-04	0.3842358D-04
ISDGMR: 73	0.3832324D-04	0.3832324D-04
ISDGMR: 74	0.3799477D-04	0.3799477D-04
ISDGMR: 75	0.3751751D-04	0.3751751D-04
ISDGMR: 76	0.3698802D-04	0.3698802D-04
ISDGMR: 77	0.3657644D-04	0.3657644D-04
ISDGMR: 78	0.3637392D-04	0.3637392D-04
ISDGMR: 79	0.3632250D-04	0.3632250D-04
ISDGMR: 80	0.3625879D-04	0.3625879D-04
ISDGMR: 81	0.3601710D-04	0.3601710D-04
ISDGMR: 82	0.3509684D-04	0.3509684D-04
ISDGMR: 83	0.3451465D-04	0.3451465D-04
ISDGMR: 84	0.3395875D-04	0.3395875D-04
ISDGMR: 85	0.3366965D-04	0.3366965D-04
ISDGMR: 86	0.3329850D-04	0.3329850D-04
ISDGMR: 87	0.3268500D-04	0.3268500D-04

ISDGMR: 88	0.3214948D-04	0.3214948D-04	ISDGMR: 161	0.1024745D-05	0.1024745D-05
ISDGMR: 89	0.3168009D-04	0.3168009D-04	ISDGMR: 162	0.9968293D-06	0.9968293D-06
ISDGMR: 90	0.3117994D-04	0.3117994D-04	ISDGMR: 163	0.9445177D-06	0.9445177D-06
ISDGMR: 91	0.3084557D-04	0.3084557D-04	ISDGMR: 164	0.9016773D-06	0.9016773D-06
ISDGMR: 92	0.2973585D-04	0.2973585D-04	ISDGMR: 165	0.8700174D-06	0.8700174D-06
ISDGMR: 93	0.2804874D-04	0.2804874D-04	ISDGMR: 166	0.8648893D-06	0.8648893D-06
ISDGMR: 94	0.2756176D-04	0.2756176D-04	ISDGMR: 167	0.8536088D-06	0.8536088D-06
ISDGMR: 95	0.2749903D-04	0.2749903D-04	ISDGMR: 168	0.8182992D-06	0.8182992D-06
ISDGMR: 96	0.2726874D-04	0.2726874D-04	ISDGMR: 169	0.7875438D-06	0.7875438D-06
ISDGMR: 97	0.2626869D-04	0.2626869D-04	ISDGMR: 170	0.7748511D-06	0.7748511D-06
ISDGMR: 98	0.2506847D-04	0.2506847D-04	ISDGMR: 171	0.7684940D-06	0.7684940D-06
ISDGMR: 99	0.2444146D-04	0.2444146D-04	ISDGMR: 172	0.7452294D-06	0.7452294D-06
ISDGMR: 100	0.2418658D-04	0.2418658D-04	ISDGMR: 173	0.7340770D-06	0.7340770D-06
ISDGMR: 101	0.2385134D-04	0.2385134D-04	ISDGMR: 174	0.7026610D-06	0.7026610D-06
ISDGMR: 102	0.2344027D-04	0.2344027D-04	ISDGMR: 175	0.6476406D-06	0.6476406D-06
ISDGMR: 103	0.2225916D-04	0.2225916D-04	ISDGMR: 176	0.6241696D-06	0.6241696D-06
ISDGMR: 104	0.2074580D-04	0.2074580D-04	ISDGMR: 177	0.6029438D-06	0.6029438D-06
ISDGMR: 105	0.1899093D-04	0.1899093D-04	ISDGMR: 178	0.5867461D-06	0.5867461D-06
ISDGMR: 106	0.1811938D-04	0.1811938D-04	ISDGMR: 179	0.5751008D-06	0.5751008D-06
ISDGMR: 107	0.1668037D-04	0.1668037D-04	ISDGMR: 180	0.5573183D-06	0.5573183D-06
ISDGMR: 108	0.1492554D-04	0.1492554D-04	ISDGMR: 181	0.5398355D-06	0.5398355D-06
ISDGMR: 109	0.1384177D-04	0.1384177D-04	ISDGMR: 182	0.5165791D-06	0.5165791D-06
ISDGMR: 110	0.1262770D-04	0.1262770D-04	ISDGMR: 183	0.4936512D-06	0.4936512D-06
ISDGMR: 111	0.1172475D-04	0.1172475D-04	ISDGMR: 184	0.4781303D-06	0.4781303D-06
ISDGMR: 112	0.1151705D-04	0.1151705D-04	ISDGMR: 185	0.4641559D-06	0.4641559D-06
ISDGMR: 113	0.1097001D-04	0.1097001D-04	ISDGMR: 186	0.4494300D-06	0.4494300D-06
ISDGMR: 114	0.1037992D-04	0.1037992D-04	ISDGMR: 187	0.4483227D-06	0.4483227D-06
ISDGMR: 115	0.9764374D-05	0.9764374D-05	ISDGMR: 188	0.4427301D-06	0.4427301D-06
ISDGMR: 116	0.9279130D-05	0.9279130D-05	ISDGMR: 189	0.4362317D-06	0.4362317D-06
ISDGMR: 117	0.8879677D-05	0.8879677D-05	ISDGMR: 190	0.4278305D-06	0.4278305D-06
ISDGMR: 118	0.8663109D-05	0.8663109D-05	ISDGMR: 191	0.4075110D-06	0.4075110D-06
ISDGMR: 119	0.8304396D-05	0.8304396D-05	ISDGMR: 192	0.3880519D-06	0.3880519D-06
ISDGMR: 120	0.7659347D-05	0.7659347D-05	ISDGMR: 193	0.3727650D-06	0.3727650D-06
ISDGMR: 121	0.7204794D-05	0.7204794D-05	ISDGMR: 194	0.3692298D-06	0.3692298D-06
ISDGMR: 122	0.6771831D-05	0.6771831D-05	ISDGMR: 195	0.3621303D-06	0.3621303D-06
ISDGMR: 123	0.6444344D-05	0.6444344D-05	ISDGMR: 196	0.3570851D-06	0.3570851D-06
ISDGMR: 124	0.5918328D-05	0.5918328D-05	ISDGMR: 197	0.3464342D-06	0.3464342D-06
ISDGMR: 125	0.5699119D-05	0.5699119D-05	ISDGMR: 198	0.3319884D-06	0.3319884D-06
ISDGMR: 126	0.5620067D-05	0.5620067D-05	ISDGMR: 199	0.3153289D-06	0.3153289D-06
ISDGMR: 127	0.5408603D-05	0.5408603D-05	ISDGMR: 200	0.3065892D-06	0.3065892D-06
ISDGMR: 128	0.5149662D-05	0.5149662D-05	ISDGMR: 201	0.3011197D-06	0.3011197D-06
ISDGMR: 129	0.4950473D-05	0.4950473D-05	ISDGMR: 202	0.2908828D-06	0.2908828D-06
ISDGMR: 130	0.4631113D-05	0.4631113D-05	ISDGMR: 203	0.2867539D-06	0.2867539D-06
ISDGMR: 131	0.4319261D-05	0.4319261D-05	ISDGMR: 204	0.2682472D-06	0.2682472D-06
ISDGMR: 132	0.4111813D-05	0.4111813D-05	ISDGMR: 205	0.2566412D-06	0.2566412D-06
ISDGMR: 133	0.3952745D-05	0.3952745D-05	ISDGMR: 206	0.2459430D-06	0.2459430D-06
ISDGMR: 134	0.3716833D-05	0.3716833D-05	ISDGMR: 207	0.2420195D-06	0.2420195D-06
ISDGMR: 135	0.3510211D-05	0.3510211D-05	ISDGMR: 208	0.2343177D-06	0.2343177D-06
ISDGMR: 136	0.3333845D-05	0.3333845D-05	ISDGMR: 209	0.2284481D-06	0.2284481D-06
ISDGMR: 137	0.3138765D-05	0.3138765D-05	ISDGMR: 210	0.2186750D-06	0.2186750D-06
ISDGMR: 138	0.2917588D-05	0.2917588D-05	ISDGMR: 211	0.2141823D-06	0.2141823D-06
ISDGMR: 139	0.2524064D-05	0.2524064D-05	ISDGMR: 212	0.2055218D-06	0.2055218D-06
ISDGMR: 140	0.2346454D-05	0.2346454D-05	ISDGMR: 213	0.2024476D-06	0.2024476D-06
ISDGMR: 141	0.2237504D-05	0.2237504D-05	ISDGMR: 214	0.1977274D-06	0.1977274D-06
ISDGMR: 142	0.2152365D-05	0.2152365D-05	ISDGMR: 215	0.1935856D-06	0.1935856D-06
ISDGMR: 143	0.2031817D-05	0.2031817D-05	ISDGMR: 216	0.1901276D-06	0.1901276D-06
ISDGMR: 144	0.1890130D-05	0.1890130D-05	ISDGMR: 217	0.1845273D-06	0.1845273D-06
ISDGMR: 145	0.1755570D-05	0.1755570D-05	ISDGMR: 218	0.1800190D-06	0.1800190D-06
ISDGMR: 146	0.1576446D-05	0.1576446D-05	ISDGMR: 219	0.1780152D-06	0.1780152D-06
ISDGMR: 147	0.1486500D-05	0.1486500D-05	ISDGMR: 220	0.1711067D-06	0.1711067D-06
ISDGMR: 148	0.1401365D-05	0.1401365D-05	ISDGMR: 221	0.1661030D-06	0.1661030D-06
ISDGMR: 149	0.1383957D-05	0.1383957D-05	ISDGMR: 222	0.1625904D-06	0.1625904D-06
ISDGMR: 150	0.1367649D-05	0.1367649D-05	ISDGMR: 223	0.1579573D-06	0.1579573D-06
ISDGMR: 151	0.1353258D-05	0.1353258D-05	ISDGMR: 224	0.1575228D-06	0.1575228D-06
ISDGMR: 152	0.1330105D-05	0.1330105D-05	ISDGMR: 225	0.1534109D-06	0.1534109D-06
ISDGMR: 153	0.1298027D-05	0.1298027D-05	ISDGMR: 226	0.1433142D-06	0.1433142D-06
ISDGMR: 154	0.1275410D-05	0.1275410D-05	ISDGMR: 227	0.1391760D-06	0.1391760D-06
ISDGMR: 155	0.1221497D-05	0.1221497D-05	ISDGMR: 228	0.1318720D-06	0.1318720D-06
ISDGMR: 156	0.1201297D-05	0.1201297D-05	ISDGMR: 229	0.1304541D-06	0.1304541D-06
ISDGMR: 157	0.1167615D-05	0.1167615D-05	ISDGMR: 230	0.1288355D-06	0.1288355D-06
ISDGMR: 158	0.1134015D-05	0.1134015D-05	ISDGMR: 231	0.1246824D-06	0.1246824D-06
ISDGMR: 159	0.1086009D-05	0.1086009D-05	ISDGMR: 232	0.1211903D-06	0.1211903D-06
ISDGMR: 160	0.1037251D-05	0.1037251D-05	ISDGMR: 233	0.1153064D-06	0.1153064D-06

ISDGMR: 234	0.1096839D-06	0.1096839D-06	ISDGMR: 307	0.3425377D-08	0.3425377D-08
ISDGMR: 235	0.1057018D-06	0.1057018D-06	ISDGMR: 308	0.3400780D-08	0.3400780D-08
ISDGMR: 236	0.1041904D-06	0.1041904D-06	ISDGMR: 309	0.3394388D-08	0.3394388D-08
ISDGMR: 237	0.1008828D-06	0.1008828D-06	ISDGMR: 310	0.3166573D-08	0.3166573D-08
ISDGMR: 238	0.9506310D-07	0.9506310D-07	ISDGMR: 311	0.3123981D-08	0.3123981D-08
ISDGMR: 239	0.8607088D-07	0.8607088D-07	ISDGMR: 312	0.3079991D-08	0.3079991D-08
ISDGMR: 240	0.8191720D-07	0.8191720D-07	ISDGMR: 313	0.3024977D-08	0.3024977D-08
ISDGMR: 241	0.7982944D-07	0.7982944D-07	ISDGMR: 314	0.2934642D-08	0.2934642D-08
ISDGMR: 242	0.7748325D-07	0.7748325D-07	ISDGMR: 315	0.2923549D-08	0.2923549D-08
ISDGMR: 243	0.7534972D-07	0.7534972D-07	ISDGMR: 316	0.2862365D-08	0.2862365D-08
ISDGMR: 244	0.7109951D-07	0.7109951D-07	ISDGMR: 317	0.2608283D-08	0.2608283D-08
ISDGMR: 245	0.6990849D-07	0.6990849D-07	ISDGMR: 318	0.2512098D-08	0.2512098D-08
ISDGMR: 246	0.6755425D-07	0.6755425D-07	ISDGMR: 319	0.2476205D-08	0.2476205D-08
ISDGMR: 247	0.6736429D-07	0.6736429D-07	ISDGMR: 320	0.2301378D-08	0.2301378D-08
ISDGMR: 248	0.6706109D-07	0.6706109D-07	ISDGMR: 321	0.2142300D-08	0.2142300D-08
ISDGMR: 249	0.6031128D-07	0.6031128D-07	ISDGMR: 322	0.2096090D-08	0.2096090D-08
ISDGMR: 250	0.5873071D-07	0.5873071D-07	ISDGMR: 323	0.1941508D-08	0.1941508D-08
ISDGMR: 251	0.5808275D-07	0.5808275D-07	ISDGMR: 324	0.1346170D-08	0.1346170D-08
ISDGMR: 252	0.5767825D-07	0.5767825D-07	ISDGMR: 325	0.1255847D-08	0.1255847D-08
ISDGMR: 253	0.5734565D-07	0.5734565D-07	ISDGMR: 326	0.1250931D-08	0.1250931D-08
ISDGMR: 254	0.5598876D-07	0.5598876D-07	ISDGMR: 327	0.1075357D-08	0.1075357D-08
ISDGMR: 255	0.5288702D-07	0.5288702D-07	ISDGMR: 328	0.1003042D-08	0.1003042D-08
ISDGMR: 256	0.5004296D-07	0.5004296D-07	ISDGMR: 329	0.9988471D-09	0.9988471D-09
ISDGMR: 257	0.4569410D-07	0.4569410D-07	ISDGMR: 330	0.9744371D-09	0.9744371D-09
ISDGMR: 258	0.4436884D-07	0.4436884D-07	ISDGMR: 331	0.8175482D-09	0.8175482D-09
ISDGMR: 259	0.4306212D-07	0.4306212D-07	ISDGMR: 332	0.7817838D-09	0.7817838D-09
ISDGMR: 260	0.4090263D-07	0.4090263D-07	ISDGMR: 333	0.7712955D-09	0.7712955D-09
ISDGMR: 261	0.3818860D-07	0.3818860D-07	ISDGMR: 334	0.6828540D-09	0.6828540D-09
ISDGMR: 262	0.3625998D-07	0.3625998D-07	ISDGMR: 335	0.5968106D-09	0.5968106D-09
ISDGMR: 263	0.3507492D-07	0.3507492D-07	ISDGMR: 336	0.5939437D-09	0.5939437D-09
ISDGMR: 264	0.3286576D-07	0.3286576D-07	ISDGMR: 337	0.5654737D-09	0.5654737D-09
ISDGMR: 265	0.3108086D-07	0.3108086D-07	ISDGMR: 338	0.4467375D-09	0.4467375D-09
ISDGMR: 266	0.3069980D-07	0.3069980D-07	ISDGMR: 339	0.4338658D-09	0.4338658D-09
ISDGMR: 267	0.3020813D-07	0.3020813D-07	ISDGMR: 340	0.4326804D-09	0.4326804D-09
ISDGMR: 268	0.2924346D-07	0.2924346D-07	ISDGMR: 341	0.4045643D-09	0.4045643D-09
ISDGMR: 269	0.2823562D-07	0.2823562D-07	ISDGMR: 342	0.2967502D-09	0.2967502D-09
ISDGMR: 270	0.2615387D-07	0.2615387D-07	ISDGMR: 343	0.2932750D-09	0.2932750D-09
ISDGMR: 271	0.2536911D-07	0.2536911D-07	ISDGMR: 344	0.2852141D-09	0.2852141D-09
ISDGMR: 272	0.2487960D-07	0.2487960D-07	ISDGMR: 345	0.2397465D-09	0.2397465D-09
ISDGMR: 273	0.2398810D-07	0.2398810D-07	ISDGMR: 346	0.2114797D-09	0.2114797D-09
ISDGMR: 274	0.2321706D-07	0.2321706D-07	ISDGMR: 347	0.2053849D-09	0.2053849D-09
ISDGMR: 275	0.1976132D-07	0.1976132D-07	ISDGMR: 348	0.1673760D-09	0.1673760D-09
ISDGMR: 276	0.1765123D-07	0.1765123D-07	ISDGMR: 349	0.1079994D-09	0.1079994D-09
ISDGMR: 277	0.1647342D-07	0.1647342D-07	ISDGMR: 350	0.1053301D-09	0.1053301D-09
ISDGMR: 278	0.1603439D-07	0.1603439D-07	ISDGMR: 351	0.9208403D-10	0.9208403D-10
ISDGMR: 279	0.1479808D-07	0.1479808D-07	IErr=	0 Err= 9.21D-11 NSaved=	2 NIter= 351 NITot= 352.
ISDGMR: 280	0.1430669D-07	0.1430669D-07	PS=	192.000000000001 PSN=	192.000000000000 RNE=
ISDGMR: 281	0.1219021D-07	0.1219021D-07			192.000000000000 Err= 4.44D-16
ISDGMR: 282	0.1165458D-07	0.1165458D-07	ITol=	4 NSAvIt= 745 ITol=	0 Tol= 1.00D-10 ItMax=
ISDGMR: 283	0.1153262D-07	0.1153262D-07			1000 IStorA=2
ISDGMR: 284	0.1150520D-07	0.1150520D-07	Conv0=	2.73D-09 BNorm=	4.90D+03 BPNorm= 7.16D+01
ISDGMR: 285	0.1043721D-07	0.1043721D-07	Conv=	1.00D-10 AccInt=	1.00D-10
ISDGMR: 286	0.9733842D-08	0.9733842D-08	Generalized	Minimum Residual for N=	744 ITol= 0 MaxL=
ISDGMR: 287	0.9356579D-08	0.9356579D-08			744 KMP= 744
ISDGMR: 288	0.9353708D-08	0.9353708D-08	Iter	Natral Err Est	Error Estimate
ISDGMR: 289	0.9111023D-08	0.9111023D-08	ISDGMR: 0	0.5606945D-02	0.5606945D-02
ISDGMR: 290	0.9030736D-08	0.9030736D-08	ISDGMR: 1	0.4585980D-02	0.4585980D-02
ISDGMR: 291	0.8729973D-08	0.8729973D-08	ISDGMR: 2	0.1933787D-02	0.1933787D-02
ISDGMR: 292	0.8626747D-08	0.8626747D-08	ISDGMR: 3	0.9851670D-03	0.9851670D-03
ISDGMR: 293	0.8490609D-08	0.8490609D-08	ISDGMR: 4	0.6729600D-03	0.6729600D-03
ISDGMR: 294	0.8272569D-08	0.8272569D-08	ISDGMR: 5	0.5709248D-03	0.5709248D-03
ISDGMR: 295	0.7902422D-08	0.7902422D-08	ISDGMR: 6	0.4999603D-03	0.4999603D-03
ISDGMR: 296	0.7637588D-08	0.7637588D-08	ISDGMR: 7	0.4453952D-03	0.4453952D-03
ISDGMR: 297	0.7256311D-08	0.7256311D-08	ISDGMR: 8	0.3746887D-03	0.3746887D-03
ISDGMR: 298	0.7070017D-08	0.7070017D-08	ISDGMR: 9	0.3109007D-03	0.3109007D-03
ISDGMR: 299	0.6800662D-08	0.6800662D-08	ISDGMR: 10	0.2725738D-03	0.2725738D-03
ISDGMR: 300	0.6683372D-08	0.6683372D-08	ISDGMR: 11	0.2109625D-03	0.2109625D-03
ISDGMR: 301	0.6373998D-08	0.6373998D-08	ISDGMR: 12	0.1870608D-03	0.1870608D-03
ISDGMR: 302	0.5634376D-08	0.5634376D-08	ISDGMR: 13	0.1594689D-03	0.1594689D-03
ISDGMR: 303	0.4468672D-08	0.4468672D-08	ISDGMR: 14	0.1475836D-03	0.1475836D-03
ISDGMR: 304	0.4378912D-08	0.4378912D-08	ISDGMR: 15	0.1285976D-03	0.1285976D-03
ISDGMR: 305	0.4368753D-08	0.4368753D-08	ISDGMR: 16	0.1163213D-03	0.1163213D-03
ISDGMR: 306	0.3692554D-08	0.3692554D-08	ISDGMR: 17	0.1050794D-03	0.1050794D-03

ISDGMR:	18	0.9038029D-04	0.9038029D-04	ISDGMR:	91	0.4091133D-05	0.4091133D-05
ISDGMR:	19	0.6990490D-04	0.6990490D-04	ISDGMR:	92	0.3795023D-05	0.3795023D-05
ISDGMR:	20	0.6409154D-04	0.6409154D-04	ISDGMR:	93	0.3617615D-05	0.3617615D-05
ISDGMR:	21	0.6118915D-04	0.6118915D-04	ISDGMR:	94	0.3517351D-05	0.3517351D-05
ISDGMR:	22	0.5502036D-04	0.5502036D-04	ISDGMR:	95	0.3412791D-05	0.3412791D-05
ISDGMR:	23	0.5001083D-04	0.5001083D-04	ISDGMR:	96	0.3311131D-05	0.3311131D-05
ISDGMR:	24	0.4738929D-04	0.4738929D-04	ISDGMR:	97	0.3221354D-05	0.3221354D-05
ISDGMR:	25	0.4447753D-04	0.4447753D-04	ISDGMR:	98	0.3097938D-05	0.3097938D-05
ISDGMR:	26	0.4234789D-04	0.4234789D-04	ISDGMR:	99	0.3024484D-05	0.3024484D-05
ISDGMR:	27	0.3955817D-04	0.3955817D-04	ISDGMR:	100	0.2860745D-05	0.2860745D-05
ISDGMR:	28	0.3738929D-04	0.3738929D-04	ISDGMR:	101	0.2697783D-05	0.2697783D-05
ISDGMR:	29	0.3456716D-04	0.3456716D-04	ISDGMR:	102	0.2598526D-05	0.2598526D-05
ISDGMR:	30	0.3150295D-04	0.3150295D-04	ISDGMR:	103	0.2571725D-05	0.2571725D-05
ISDGMR:	31	0.3010339D-04	0.3010339D-04	ISDGMR:	104	0.2541831D-05	0.2541831D-05
ISDGMR:	32	0.2952674D-04	0.2952674D-04	ISDGMR:	105	0.2464933D-05	0.2464933D-05
ISDGMR:	33	0.2938314D-04	0.2938314D-04	ISDGMR:	106	0.2388892D-05	0.2388892D-05
ISDGMR:	34	0.2850472D-04	0.2850472D-04	ISDGMR:	107	0.2339070D-05	0.2339070D-05
ISDGMR:	35	0.2738273D-04	0.2738273D-04	ISDGMR:	108	0.2293221D-05	0.2293221D-05
ISDGMR:	36	0.2637606D-04	0.2637606D-04	ISDGMR:	109	0.2277789D-05	0.2277789D-05
ISDGMR:	37	0.2596692D-04	0.2596692D-04	ISDGMR:	110	0.2266260D-05	0.2266260D-05
ISDGMR:	38	0.2558245D-04	0.2558245D-04	ISDGMR:	111	0.2247046D-05	0.2247046D-05
ISDGMR:	39	0.2542422D-04	0.2542422D-04	ISDGMR:	112	0.2166111D-05	0.2166111D-05
ISDGMR:	40	0.2535334D-04	0.2535334D-04	ISDGMR:	113	0.2154729D-05	0.2154729D-05
ISDGMR:	41	0.2424822D-04	0.2424822D-04	ISDGMR:	114	0.2153566D-05	0.2153566D-05
ISDGMR:	42	0.2286546D-04	0.2286546D-04	ISDGMR:	115	0.2137670D-05	0.2137670D-05
ISDGMR:	43	0.2239601D-04	0.2239601D-04	ISDGMR:	116	0.2064065D-05	0.2064065D-05
ISDGMR:	44	0.2239008D-04	0.2239008D-04	ISDGMR:	117	0.2023010D-05	0.2023010D-05
ISDGMR:	45	0.2232502D-04	0.2232502D-04	ISDGMR:	118	0.1987554D-05	0.1987554D-05
ISDGMR:	46	0.2156424D-04	0.2156424D-04	ISDGMR:	119	0.1980813D-05	0.1980813D-05
ISDGMR:	47	0.2131316D-04	0.2131316D-04	ISDGMR:	120	0.1944315D-05	0.1944315D-05
ISDGMR:	48	0.2043617D-04	0.2043617D-04	ISDGMR:	121	0.1895037D-05	0.1895037D-05
ISDGMR:	49	0.2008076D-04	0.2008076D-04	ISDGMR:	122	0.1879382D-05	0.1879382D-05
ISDGMR:	50	0.2002574D-04	0.2002574D-04	ISDGMR:	123	0.1855244D-05	0.1855244D-05
ISDGMR:	51	0.1990548D-04	0.1990548D-04	ISDGMR:	124	0.1831469D-05	0.1831469D-05
ISDGMR:	52	0.1971714D-04	0.1971714D-04	ISDGMR:	125	0.1817193D-05	0.1817193D-05
ISDGMR:	53	0.1954592D-04	0.1954592D-04	ISDGMR:	126	0.1747124D-05	0.1747124D-05
ISDGMR:	54	0.1947578D-04	0.1947578D-04	ISDGMR:	127	0.1694791D-05	0.1694791D-05
ISDGMR:	55	0.1944114D-04	0.1944114D-04	ISDGMR:	128	0.1667115D-05	0.1667115D-05
ISDGMR:	56	0.1943982D-04	0.1943982D-04	ISDGMR:	129	0.1608645D-05	0.1608645D-05
ISDGMR:	57	0.1923923D-04	0.1923923D-04	ISDGMR:	130	0.1516889D-05	0.1516889D-05
ISDGMR:	58	0.1854894D-04	0.1854894D-04	ISDGMR:	131	0.1428305D-05	0.1428305D-05
ISDGMR:	59	0.1853607D-04	0.1853607D-04	ISDGMR:	132	0.1352166D-05	0.1352166D-05
ISDGMR:	60	0.1815614D-04	0.1815614D-04	ISDGMR:	133	0.1281290D-05	0.1281290D-05
ISDGMR:	61	0.1798679D-04	0.1798679D-04	ISDGMR:	134	0.1214539D-05	0.1214539D-05
ISDGMR:	62	0.1726193D-04	0.1726193D-04	ISDGMR:	135	0.1183275D-05	0.1183275D-05
ISDGMR:	63	0.1673828D-04	0.1673828D-04	ISDGMR:	136	0.1142477D-05	0.1142477D-05
ISDGMR:	64	0.1672680D-04	0.1672680D-04	ISDGMR:	137	0.1067884D-05	0.1067884D-05
ISDGMR:	65	0.1648699D-04	0.1648699D-04	ISDGMR:	138	0.1038160D-05	0.1038160D-05
ISDGMR:	66	0.1601025D-04	0.1601025D-04	ISDGMR:	139	0.1001164D-05	0.1001164D-05
ISDGMR:	67	0.1554789D-04	0.1554789D-04	ISDGMR:	140	0.9439048D-06	0.9439048D-06
ISDGMR:	68	0.1517597D-04	0.1517597D-04	ISDGMR:	141	0.9339930D-06	0.9339930D-06
ISDGMR:	69	0.1504533D-04	0.1504533D-04	ISDGMR:	142	0.9193757D-06	0.9193757D-06
ISDGMR:	70	0.1488108D-04	0.1488108D-04	ISDGMR:	143	0.8834343D-06	0.8834343D-06
ISDGMR:	71	0.1460300D-04	0.1460300D-04	ISDGMR:	144	0.8704428D-06	0.8704428D-06
ISDGMR:	72	0.1388943D-04	0.1388943D-04	ISDGMR:	145	0.8543997D-06	0.8543997D-06
ISDGMR:	73	0.1302308D-04	0.1302308D-04	ISDGMR:	146	0.8390531D-06	0.8390531D-06
ISDGMR:	74	0.1274421D-04	0.1274421D-04	ISDGMR:	147	0.8176248D-06	0.8176248D-06
ISDGMR:	75	0.1222005D-04	0.1222005D-04	ISDGMR:	148	0.7946262D-06	0.7946262D-06
ISDGMR:	76	0.1154222D-04	0.1154222D-04	ISDGMR:	149	0.7559621D-06	0.7559621D-06
ISDGMR:	77	0.1102874D-04	0.1102874D-04	ISDGMR:	150	0.7293019D-06	0.7293019D-06
ISDGMR:	78	0.1053256D-04	0.1053256D-04	ISDGMR:	151	0.7162604D-06	0.7162604D-06
ISDGMR:	79	0.9334776D-05	0.9334776D-05	ISDGMR:	152	0.7141433D-06	0.7141433D-06
ISDGMR:	80	0.8436927D-05	0.8436927D-05	ISDGMR:	153	0.6891352D-06	0.6891352D-06
ISDGMR:	81	0.7879078D-05	0.7879078D-05	ISDGMR:	154	0.6778089D-06	0.6778089D-06
ISDGMR:	82	0.7135015D-05	0.7135015D-05	ISDGMR:	155	0.6133226D-06	0.6133226D-06
ISDGMR:	83	0.6563526D-05	0.6563526D-05	ISDGMR:	156	0.5661425D-06	0.5661425D-06
ISDGMR:	84	0.6018225D-05	0.6018225D-05	ISDGMR:	157	0.5415081D-06	0.5415081D-06
ISDGMR:	85	0.5834821D-05	0.5834821D-05	ISDGMR:	158	0.5341989D-06	0.5341989D-06
ISDGMR:	86	0.5456214D-05	0.5456214D-05	ISDGMR:	159	0.5224083D-06	0.5224083D-06
ISDGMR:	87	0.5184148D-05	0.5184148D-05	ISDGMR:	160	0.5079388D-06	0.5079388D-06
ISDGMR:	88	0.4843791D-05	0.4843791D-05	ISDGMR:	161	0.4983597D-06	0.4983597D-06
ISDGMR:	89	0.4584042D-05	0.4584042D-05	ISDGMR:	162	0.4912509D-06	0.4912509D-06
ISDGMR:	90	0.4416457D-05	0.4416457D-05	ISDGMR:	163	0.4756724D-06	0.4756724D-06

ISDGMR: 164	0.4608052D-06	0.4608052D-06	ISDGMR: 237	0.4310673D-07	0.4310673D-07
ISDGMR: 165	0.4482879D-06	0.4482879D-06	ISDGMR: 238	0.4200437D-07	0.4200437D-07
ISDGMR: 166	0.4448652D-06	0.4448652D-06	ISDGMR: 239	0.4036290D-07	0.4036290D-07
ISDGMR: 167	0.4344509D-06	0.4344509D-06	ISDGMR: 240	0.3959533D-07	0.3959533D-07
ISDGMR: 168	0.4259915D-06	0.4259915D-06	ISDGMR: 241	0.3803522D-07	0.3803522D-07
ISDGMR: 169	0.4181242D-06	0.4181242D-06	ISDGMR: 242	0.3784505D-07	0.3784505D-07
ISDGMR: 170	0.4128695D-06	0.4128695D-06	ISDGMR: 243	0.3758443D-07	0.3758443D-07
ISDGMR: 171	0.4071011D-06	0.4071011D-06	ISDGMR: 244	0.3724365D-07	0.3724365D-07
ISDGMR: 172	0.3945275D-06	0.3945275D-06	ISDGMR: 245	0.3510376D-07	0.3510376D-07
ISDGMR: 173	0.3831254D-06	0.3831254D-06	ISDGMR: 246	0.3403586D-07	0.3403586D-07
ISDGMR: 174	0.3787277D-06	0.3787277D-06	ISDGMR: 247	0.3366027D-07	0.3366027D-07
ISDGMR: 175	0.3738617D-06	0.3738617D-06	ISDGMR: 248	0.3342053D-07	0.3342053D-07
ISDGMR: 176	0.3625013D-06	0.3625013D-06	ISDGMR: 249	0.3138424D-07	0.3138424D-07
ISDGMR: 177	0.3524099D-06	0.3524099D-06	ISDGMR: 250	0.2944589D-07	0.2944589D-07
ISDGMR: 178	0.3415386D-06	0.3415386D-06	ISDGMR: 251	0.2759017D-07	0.2759017D-07
ISDGMR: 179	0.3214643D-06	0.3214643D-06	ISDGMR: 252	0.2588001D-07	0.2588001D-07
ISDGMR: 180	0.3122432D-06	0.3122432D-06	ISDGMR: 253	0.2483157D-07	0.2483157D-07
ISDGMR: 181	0.3070432D-06	0.3070432D-06	ISDGMR: 254	0.2396591D-07	0.2396591D-07
ISDGMR: 182	0.3018846D-06	0.3018846D-06	ISDGMR: 255	0.2389094D-07	0.2389094D-07
ISDGMR: 183	0.2836287D-06	0.2836287D-06	ISDGMR: 256	0.2270682D-07	0.2270682D-07
ISDGMR: 184	0.2640086D-06	0.2640086D-06	ISDGMR: 257	0.1943303D-07	0.1943303D-07
ISDGMR: 185	0.2365994D-06	0.2365994D-06	ISDGMR: 258	0.1828570D-07	0.1828570D-07
ISDGMR: 186	0.2285540D-06	0.2285540D-06	ISDGMR: 259	0.1813370D-07	0.1813370D-07
ISDGMR: 187	0.2214255D-06	0.2214255D-06	ISDGMR: 260	0.1808363D-07	0.1808363D-07
ISDGMR: 188	0.2103482D-06	0.2103482D-06	ISDGMR: 261	0.1792671D-07	0.1792671D-07
ISDGMR: 189	0.2000036D-06	0.2000036D-06	ISDGMR: 262	0.1738526D-07	0.1738526D-07
ISDGMR: 190	0.1881563D-06	0.1881563D-06	ISDGMR: 263	0.1689978D-07	0.1689978D-07
ISDGMR: 191	0.1774571D-06	0.1774571D-06	ISDGMR: 264	0.1556660D-07	0.1556660D-07
ISDGMR: 192	0.1747270D-06	0.1747270D-06	ISDGMR: 265	0.1462000D-07	0.1462000D-07
ISDGMR: 193	0.1719362D-06	0.1719362D-06	ISDGMR: 266	0.1441879D-07	0.1441879D-07
ISDGMR: 194	0.1686347D-06	0.1686347D-06	ISDGMR: 267	0.1347165D-07	0.1347165D-07
ISDGMR: 195	0.1653944D-06	0.1653944D-06	ISDGMR: 268	0.1274777D-07	0.1274777D-07
ISDGMR: 196	0.1598157D-06	0.1598157D-06	ISDGMR: 269	0.1172967D-07	0.1172967D-07
ISDGMR: 197	0.1550035D-06	0.1550035D-06	ISDGMR: 270	0.1105720D-07	0.1105720D-07
ISDGMR: 198	0.1544382D-06	0.1544382D-06	ISDGMR: 271	0.1067635D-07	0.1067635D-07
ISDGMR: 199	0.1475906D-06	0.1475906D-06	ISDGMR: 272	0.1012592D-07	0.1012592D-07
ISDGMR: 200	0.1411552D-06	0.1411552D-06	ISDGMR: 273	0.9703192D-08	0.9703192D-08
ISDGMR: 201	0.1398373D-06	0.1398373D-06	ISDGMR: 274	0.8636007D-08	0.8636007D-08
ISDGMR: 202	0.1364437D-06	0.1364437D-06	ISDGMR: 275	0.8196325D-08	0.8196325D-08
ISDGMR: 203	0.1348052D-06	0.1348052D-06	ISDGMR: 276	0.7949623D-08	0.7949623D-08
ISDGMR: 204	0.1324910D-06	0.1324910D-06	ISDGMR: 277	0.7880402D-08	0.7880402D-08
ISDGMR: 205	0.1285822D-06	0.1285822D-06	ISDGMR: 278	0.7821910D-08	0.7821910D-08
ISDGMR: 206	0.1277727D-06	0.1277727D-06	ISDGMR: 279	0.7541187D-08	0.7541187D-08
ISDGMR: 207	0.1249595D-06	0.1249595D-06	ISDGMR: 280	0.7227603D-08	0.7227603D-08
ISDGMR: 208	0.1198041D-06	0.1198041D-06	ISDGMR: 281	0.7010409D-08	0.7010409D-08
ISDGMR: 209	0.1195213D-06	0.1195213D-06	ISDGMR: 282	0.6883190D-08	0.6883190D-08
ISDGMR: 210	0.1166120D-06	0.1166120D-06	ISDGMR: 283	0.6857697D-08	0.6857697D-08
ISDGMR: 211	0.1157865D-06	0.1157865D-06	ISDGMR: 284	0.6575152D-08	0.6575152D-08
ISDGMR: 212	0.1131488D-06	0.1131488D-06	ISDGMR: 285	0.6306368D-08	0.6306368D-08
ISDGMR: 213	0.1106354D-06	0.1106354D-06	ISDGMR: 286	0.6115013D-08	0.6115013D-08
ISDGMR: 214	0.1081202D-06	0.1081202D-06	ISDGMR: 287	0.5976288D-08	0.5976288D-08
ISDGMR: 215	0.1059018D-06	0.1059018D-06	ISDGMR: 288	0.5971122D-08	0.5971122D-08
ISDGMR: 216	0.1001594D-06	0.1001594D-06	ISDGMR: 289	0.5876641D-08	0.5876641D-08
ISDGMR: 217	0.9557658D-07	0.9557658D-07	ISDGMR: 290	0.5665292D-08	0.5665292D-08
ISDGMR: 218	0.9132193D-07	0.9132193D-07	ISDGMR: 291	0.5245792D-08	0.5245792D-08
ISDGMR: 219	0.8660026D-07	0.8660026D-07	ISDGMR: 292	0.5058528D-08	0.5058528D-08
ISDGMR: 220	0.8248713D-07	0.8248713D-07	ISDGMR: 293	0.4865292D-08	0.4865292D-08
ISDGMR: 221	0.7835465D-07	0.7835465D-07	ISDGMR: 294	0.4801542D-08	0.4801542D-08
ISDGMR: 222	0.7600121D-07	0.7600121D-07	ISDGMR: 295	0.4668528D-08	0.4668528D-08
ISDGMR: 223	0.7206725D-07	0.7206725D-07	ISDGMR: 296	0.3771937D-08	0.3771937D-08
ISDGMR: 224	0.6894709D-07	0.6894709D-07	ISDGMR: 297	0.3512822D-08	0.3512822D-08
ISDGMR: 225	0.6777891D-07	0.6777891D-07	ISDGMR: 298	0.3473733D-08	0.3473733D-08
ISDGMR: 226	0.6493662D-07	0.6493662D-07	ISDGMR: 299	0.3368177D-08	0.3368177D-08
ISDGMR: 227	0.6190772D-07	0.6190772D-07	ISDGMR: 300	0.3277643D-08	0.3277643D-08
ISDGMR: 228	0.5955405D-07	0.5955405D-07	ISDGMR: 301	0.3099996D-08	0.3099996D-08
ISDGMR: 229	0.5705892D-07	0.5705892D-07	ISDGMR: 302	0.2883965D-08	0.2883965D-08
ISDGMR: 230	0.5585810D-07	0.5585810D-07	ISDGMR: 303	0.2689943D-08	0.2689943D-08
ISDGMR: 231	0.5510777D-07	0.5510777D-07	ISDGMR: 304	0.2651049D-08	0.2651049D-08
ISDGMR: 232	0.5341802D-07	0.5341802D-07	ISDGMR: 305	0.2583161D-08	0.2583161D-08
ISDGMR: 233	0.5019891D-07	0.5019891D-07	ISDGMR: 306	0.2294609D-08	0.2294609D-08
ISDGMR: 234	0.4660069D-07	0.4660069D-07	ISDGMR: 307	0.2202318D-08	0.2202318D-08
ISDGMR: 235	0.4481933D-07	0.4481933D-07	ISDGMR: 308	0.2175194D-08	0.2175194D-08
ISDGMR: 236	0.4400579D-07	0.4400579D-07	ISDGMR: 309	0.2090950D-08	0.2090950D-08

```

ISDGMR: 310 0.1846593D-08 0.1846593D-08
ISDGMR: 311 0.1544524D-08 0.1544524D-08
ISDGMR: 312 0.1381552D-08 0.1381552D-08
ISDGMR: 313 0.1247431D-08 0.1247431D-08
ISDGMR: 314 0.1220094D-08 0.1220094D-08
ISDGMR: 315 0.1155309D-08 0.1155309D-08
ISDGMR: 316 0.9632212D-09 0.9632212D-09
ISDGMR: 317 0.9332930D-09 0.9332930D-09
ISDGMR: 318 0.9328471D-09 0.9328471D-09
ISDGMR: 319 0.9229322D-09 0.9229322D-09
ISDGMR: 320 0.7311334D-09 0.7311334D-09
ISDGMR: 321 0.7027639D-09 0.7027639D-09
ISDGMR: 322 0.6787115D-09 0.6787115D-09
ISDGMR: 323 0.5334613D-09 0.5334613D-09
ISDGMR: 324 0.4592675D-09 0.4592675D-09
ISDGMR: 325 0.4580505D-09 0.4580505D-09
ISDGMR: 326 0.4308574D-09 0.4308574D-09
ISDGMR: 327 0.3642736D-09 0.3642736D-09
ISDGMR: 328 0.3523943D-09 0.3523943D-09
ISDGMR: 329 0.3330797D-09 0.3330797D-09
ISDGMR: 330 0.2358791D-09 0.2358791D-09
ISDGMR: 331 0.1919533D-09 0.1919533D-09
ISDGMR: 332 0.1879367D-09 0.1879367D-09
ISDGMR: 333 0.1843324D-09 0.1843324D-09
ISDGMR: 334 0.1549266D-09 0.1549266D-09
ISDGMR: 335 0.1415858D-09 0.1415858D-09
ISDGMR: 336 0.1394479D-09 0.1394479D-09
ISDGMR: 337 0.1298389D-09 0.1298389D-09
ISDGMR: 338 0.9665465D-10 0.9665465D-10
IErr= 0 Err= 9.67D-11 NSaved= 3 NIter= 338 NITot= 342.
PS= 192.000000000002 PSN= 192.000000000000 RNE=
192.000000000000 Err=-1.48D-16
ItDFit: ISolve= 4 NSavIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=
1000 IStorA=2
Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.61D+03 BPNorm= 6.95D+01
Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10
Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=
744 KMP= 744
Iter Natral Err Est Error Estimate
ISDGMR: 0 0.3493489D-02 0.3493489D-02
ISDGMR: 1 0.2822157D-02 0.2822157D-02
ISDGMR: 2 0.1487145D-02 0.1487145D-02
ISDGMR: 3 0.6982618D-03 0.6982618D-03
ISDGMR: 4 0.4511100D-03 0.4511100D-03
ISDGMR: 5 0.3052163D-03 0.3052163D-03
ISDGMR: 6 0.2477752D-03 0.2477752D-03
ISDGMR: 7 0.2369553D-03 0.2369553D-03
ISDGMR: 8 0.2290620D-03 0.2290620D-03
ISDGMR: 9 0.2168212D-03 0.2168212D-03
ISDGMR: 10 0.2094911D-03 0.2094911D-03
ISDGMR: 11 0.1982586D-03 0.1982586D-03
ISDGMR: 12 0.1881801D-03 0.1881801D-03
ISDGMR: 13 0.1670382D-03 0.1670382D-03
ISDGMR: 14 0.1345095D-03 0.1345095D-03
ISDGMR: 15 0.1100508D-03 0.1100508D-03
ISDGMR: 16 0.9722755D-04 0.9722755D-04
ISDGMR: 17 0.8391099D-04 0.8391099D-04
ISDGMR: 18 0.7918334D-04 0.7918334D-04
ISDGMR: 19 0.7511107D-04 0.7511107D-04
ISDGMR: 20 0.6949308D-04 0.6949308D-04
ISDGMR: 21 0.6069636D-04 0.6069636D-04
ISDGMR: 22 0.5500721D-04 0.5500721D-04
ISDGMR: 23 0.5108261D-04 0.5108261D-04
ISDGMR: 24 0.4705482D-04 0.4705482D-04
ISDGMR: 25 0.4243106D-04 0.4243106D-04
ISDGMR: 26 0.3979868D-04 0.3979868D-04
ISDGMR: 27 0.3723785D-04 0.3723785D-04
ISDGMR: 28 0.3410596D-04 0.3410596D-04
ISDGMR: 29 0.2945008D-04 0.2945008D-04
ISDGMR: 30 0.2559977D-04 0.2559977D-04
ISDGMR: 31 0.2435255D-04 0.2435255D-04
ISDGMR: 32 0.2363416D-04 0.2363416D-04
ISDGMR: 33 0.2291535D-04 0.2291535D-04
ISDGMR: 34 0.2202635D-04 0.2202635D-04
ISDGMR: 35 0.2114372D-04 0.2114372D-04
ISDGMR: 36 0.1971314D-04 0.1971314D-04
ISDGMR: 37 0.1825470D-04 0.1825470D-04
ISDGMR: 38 0.1689627D-04 0.1689627D-04
ISDGMR: 39 0.1533695D-04 0.1533695D-04
ISDGMR: 40 0.1409824D-04 0.1409824D-04
ISDGMR: 41 0.1359446D-04 0.1359446D-04
ISDGMR: 42 0.1318319D-04 0.1318319D-04
ISDGMR: 43 0.1273693D-04 0.1273693D-04
ISDGMR: 44 0.1259707D-04 0.1259707D-04
ISDGMR: 45 0.1242217D-04 0.1242217D-04
ISDGMR: 46 0.1221230D-04 0.1221230D-04
ISDGMR: 47 0.1206843D-04 0.1206843D-04
ISDGMR: 48 0.1191879D-04 0.1191879D-04
ISDGMR: 49 0.1163430D-04 0.1163430D-04
ISDGMR: 50 0.1117287D-04 0.1117287D-04
ISDGMR: 51 0.1079699D-04 0.1079699D-04
ISDGMR: 52 0.1044585D-04 0.1044585D-04
ISDGMR: 53 0.1022956D-04 0.1022956D-04
ISDGMR: 54 0.1018055D-04 0.1018055D-04
ISDGMR: 55 0.1006731D-04 0.1006731D-04
ISDGMR: 56 0.9867883D-05 0.9867883D-05
ISDGMR: 57 0.9771493D-05 0.9771493D-05
ISDGMR: 58 0.9650236D-05 0.9650236D-05
ISDGMR: 59 0.9480161D-05 0.9480161D-05
ISDGMR: 60 0.9407588D-05 0.9407588D-05
ISDGMR: 61 0.9317916D-05 0.9317916D-05
ISDGMR: 62 0.9242315D-05 0.9242315D-05
ISDGMR: 63 0.9165641D-05 0.9165641D-05
ISDGMR: 64 0.8949268D-05 0.8949268D-05
ISDGMR: 65 0.8841199D-05 0.8841199D-05
ISDGMR: 66 0.8748995D-05 0.8748995D-05
ISDGMR: 67 0.8546190D-05 0.8546190D-05
ISDGMR: 68 0.8483031D-05 0.8483031D-05
ISDGMR: 69 0.8474704D-05 0.8474704D-05
ISDGMR: 70 0.8283102D-05 0.8283102D-05
ISDGMR: 71 0.8070189D-05 0.8070189D-05
ISDGMR: 72 0.7934184D-05 0.7934184D-05
ISDGMR: 73 0.7932656D-05 0.7932656D-05
ISDGMR: 74 0.7809274D-05 0.7809274D-05
ISDGMR: 75 0.7476070D-05 0.7476070D-05
ISDGMR: 76 0.7228640D-05 0.7228640D-05
ISDGMR: 77 0.7093941D-05 0.7093941D-05
ISDGMR: 78 0.6925880D-05 0.6925880D-05
ISDGMR: 79 0.6549201D-05 0.6549201D-05
ISDGMR: 80 0.6121672D-05 0.6121672D-05
ISDGMR: 81 0.5744470D-05 0.5744470D-05
ISDGMR: 82 0.5349501D-05 0.5349501D-05
ISDGMR: 83 0.4980297D-05 0.4980297D-05
ISDGMR: 84 0.4666998D-05 0.4666998D-05
ISDGMR: 85 0.4512831D-05 0.4512831D-05
ISDGMR: 86 0.4303964D-05 0.4303964D-05
ISDGMR: 87 0.3911343D-05 0.3911343D-05
ISDGMR: 88 0.3510332D-05 0.3510332D-05
ISDGMR: 89 0.3358983D-05 0.3358983D-05
ISDGMR: 90 0.3136635D-05 0.3136635D-05
ISDGMR: 91 0.2814387D-05 0.2814387D-05
ISDGMR: 92 0.2445822D-05 0.2445822D-05
ISDGMR: 93 0.2337633D-05 0.2337633D-05
ISDGMR: 94 0.2171332D-05 0.2171332D-05
ISDGMR: 95 0.2041846D-05 0.2041846D-05
ISDGMR: 96 0.2023710D-05 0.2023710D-05
ISDGMR: 97 0.1985976D-05 0.1985976D-05
ISDGMR: 98 0.1870905D-05 0.1870905D-05
ISDGMR: 99 0.1768243D-05 0.1768243D-05
ISDGMR: 100 0.1710580D-05 0.1710580D-05
ISDGMR: 101 0.1635506D-05 0.1635506D-05
ISDGMR: 102 0.1559157D-05 0.1559157D-05
ISDGMR: 103 0.1510936D-05 0.1510936D-05
ISDGMR: 104 0.1487320D-05 0.1487320D-05
ISDGMR: 105 0.1427964D-05 0.1427964D-05
ISDGMR: 106 0.1347955D-05 0.1347955D-05

```

ISDGMR: 107	0.1314693D-05	0.1314693D-05	ISDGMR: 180	0.1913745D-06	0.1913745D-06
ISDGMR: 108	0.1234585D-05	0.1234585D-05	ISDGMR: 181	0.1889880D-06	0.1889880D-06
ISDGMR: 109	0.1187334D-05	0.1187334D-05	ISDGMR: 182	0.1798300D-06	0.1798300D-06
ISDGMR: 110	0.1171274D-05	0.1171274D-05	ISDGMR: 183	0.1745735D-06	0.1745735D-06
ISDGMR: 111	0.1151733D-05	0.1151733D-05	ISDGMR: 184	0.1716785D-06	0.1716785D-06
ISDGMR: 112	0.1134974D-05	0.1134974D-05	ISDGMR: 185	0.1682792D-06	0.1682792D-06
ISDGMR: 113	0.1121602D-05	0.1121602D-05	ISDGMR: 186	0.1674767D-06	0.1674767D-06
ISDGMR: 114	0.1096383D-05	0.1096383D-05	ISDGMR: 187	0.1665805D-06	0.1665805D-06
ISDGMR: 115	0.1067251D-05	0.1067251D-05	ISDGMR: 188	0.1562432D-06	0.1562432D-06
ISDGMR: 116	0.1049116D-05	0.1049116D-05	ISDGMR: 189	0.1456765D-06	0.1456765D-06
ISDGMR: 117	0.1033938D-05	0.1033938D-05	ISDGMR: 190	0.1370623D-06	0.1370623D-06
ISDGMR: 118	0.1021368D-05	0.1021368D-05	ISDGMR: 191	0.1308322D-06	0.1308322D-06
ISDGMR: 119	0.9947290D-06	0.9947290D-06	ISDGMR: 192	0.1263444D-06	0.1263444D-06
ISDGMR: 120	0.9860819D-06	0.9860819D-06	ISDGMR: 193	0.1245166D-06	0.1245166D-06
ISDGMR: 121	0.9731853D-06	0.9731853D-06	ISDGMR: 194	0.1183371D-06	0.1183371D-06
ISDGMR: 122	0.9621085D-06	0.9621085D-06	ISDGMR: 195	0.1169922D-06	0.1169922D-06
ISDGMR: 123	0.9477732D-06	0.9477732D-06	ISDGMR: 196	0.1111995D-06	0.1111995D-06
ISDGMR: 124	0.9302543D-06	0.9302543D-06	ISDGMR: 197	0.1047629D-06	0.1047629D-06
ISDGMR: 125	0.9163926D-06	0.9163926D-06	ISDGMR: 198	0.9975642D-07	0.9975642D-07
ISDGMR: 126	0.8844346D-06	0.8844346D-06	ISDGMR: 199	0.9795089D-07	0.9795089D-07
ISDGMR: 127	0.8741404D-06	0.8741404D-06	ISDGMR: 200	0.9528987D-07	0.9528987D-07
ISDGMR: 128	0.8648466D-06	0.8648466D-06	ISDGMR: 201	0.9324948D-07	0.9324948D-07
ISDGMR: 129	0.8442882D-06	0.8442882D-06	ISDGMR: 202	0.8937474D-07	0.8937474D-07
ISDGMR: 130	0.7979611D-06	0.7979611D-06	ISDGMR: 203	0.8536299D-07	0.8536299D-07
ISDGMR: 131	0.7688808D-06	0.7688808D-06	ISDGMR: 204	0.8022898D-07	0.8022898D-07
ISDGMR: 132	0.7482985D-06	0.7482985D-06	ISDGMR: 205	0.7616099D-07	0.7616099D-07
ISDGMR: 133	0.7408217D-06	0.7408217D-06	ISDGMR: 206	0.7442513D-07	0.7442513D-07
ISDGMR: 134	0.7104453D-06	0.7104453D-06	ISDGMR: 207	0.7236818D-07	0.7236818D-07
ISDGMR: 135	0.6932564D-06	0.6932564D-06	ISDGMR: 208	0.6818168D-07	0.6818168D-07
ISDGMR: 136	0.6590106D-06	0.6590106D-06	ISDGMR: 209	0.6780292D-07	0.6780292D-07
ISDGMR: 137	0.6322824D-06	0.6322824D-06	ISDGMR: 210	0.6613885D-07	0.6613885D-07
ISDGMR: 138	0.6109357D-06	0.6109357D-06	ISDGMR: 211	0.6483198D-07	0.6483198D-07
ISDGMR: 139	0.6033511D-06	0.6033511D-06	ISDGMR: 212	0.6331318D-07	0.6331318D-07
ISDGMR: 140	0.5929593D-06	0.5929593D-06	ISDGMR: 213	0.5980289D-07	0.5980289D-07
ISDGMR: 141	0.5781682D-06	0.5781682D-06	ISDGMR: 214	0.5954365D-07	0.5954365D-07
ISDGMR: 142	0.5595959D-06	0.5595959D-06	ISDGMR: 215	0.5848961D-07	0.5848961D-07
ISDGMR: 143	0.5392388D-06	0.5392388D-06	ISDGMR: 216	0.5737638D-07	0.5737638D-07
ISDGMR: 144	0.5235616D-06	0.5235616D-06	ISDGMR: 217	0.5473425D-07	0.5473425D-07
ISDGMR: 145	0.5090209D-06	0.5090209D-06	ISDGMR: 218	0.5120564D-07	0.5120564D-07
ISDGMR: 146	0.5049086D-06	0.5049086D-06	ISDGMR: 219	0.5074769D-07	0.5074769D-07
ISDGMR: 147	0.4923143D-06	0.4923143D-06	ISDGMR: 220	0.4968542D-07	0.4968542D-07
ISDGMR: 148	0.4751576D-06	0.4751576D-06	ISDGMR: 221	0.4859262D-07	0.4859262D-07
ISDGMR: 149	0.4662390D-06	0.4662390D-06	ISDGMR: 222	0.4838762D-07	0.4838762D-07
ISDGMR: 150	0.4543331D-06	0.4543331D-06	ISDGMR: 223	0.4647059D-07	0.4647059D-07
ISDGMR: 151	0.4490892D-06	0.4490892D-06	ISDGMR: 224	0.4401519D-07	0.4401519D-07
ISDGMR: 152	0.4409997D-06	0.4409997D-06	ISDGMR: 225	0.4326686D-07	0.4326686D-07
ISDGMR: 153	0.4179744D-06	0.4179744D-06	ISDGMR: 226	0.4082896D-07	0.4082896D-07
ISDGMR: 154	0.4017354D-06	0.4017354D-06	ISDGMR: 227	0.4077162D-07	0.4077162D-07
ISDGMR: 155	0.3923852D-06	0.3923852D-06	ISDGMR: 228	0.3984615D-07	0.3984615D-07
ISDGMR: 156	0.3816892D-06	0.3816892D-06	ISDGMR: 229	0.3877383D-07	0.3877383D-07
ISDGMR: 157	0.3637692D-06	0.3637692D-06	ISDGMR: 230	0.3864073D-07	0.3864073D-07
ISDGMR: 158	0.3472919D-06	0.3472919D-06	ISDGMR: 231	0.3698583D-07	0.3698583D-07
ISDGMR: 159	0.3386370D-06	0.3386370D-06	ISDGMR: 232	0.3657783D-07	0.3657783D-07
ISDGMR: 160	0.3157743D-06	0.3157743D-06	ISDGMR: 233	0.3619340D-07	0.3619340D-07
ISDGMR: 161	0.3032512D-06	0.3032512D-06	ISDGMR: 234	0.3516689D-07	0.3516689D-07
ISDGMR: 162	0.2968668D-06	0.2968668D-06	ISDGMR: 235	0.3453154D-07	0.3453154D-07
ISDGMR: 163	0.2888804D-06	0.2888804D-06	ISDGMR: 236	0.3268987D-07	0.3268987D-07
ISDGMR: 164	0.2826303D-06	0.2826303D-06	ISDGMR: 237	0.3176668D-07	0.3176668D-07
ISDGMR: 165	0.2799856D-06	0.2799856D-06	ISDGMR: 238	0.3138320D-07	0.3138320D-07
ISDGMR: 166	0.2631507D-06	0.2631507D-06	ISDGMR: 239	0.3086635D-07	0.3086635D-07
ISDGMR: 167	0.2552902D-06	0.2552902D-06	ISDGMR: 240	0.3051809D-07	0.3051809D-07
ISDGMR: 168	0.2524393D-06	0.2524393D-06	ISDGMR: 241	0.2939889D-07	0.2939889D-07
ISDGMR: 169	0.2470437D-06	0.2470437D-06	ISDGMR: 242	0.2827647D-07	0.2827647D-07
ISDGMR: 170	0.2425931D-06	0.2425931D-06	ISDGMR: 243	0.2793165D-07	0.2793165D-07
ISDGMR: 171	0.2331162D-06	0.2331162D-06	ISDGMR: 244	0.2692557D-07	0.2692557D-07
ISDGMR: 172	0.2284765D-06	0.2284765D-06	ISDGMR: 245	0.2581943D-07	0.2581943D-07
ISDGMR: 173	0.2255521D-06	0.2255521D-06	ISDGMR: 246	0.2477570D-07	0.2477570D-07
ISDGMR: 174	0.2189546D-06	0.2189546D-06	ISDGMR: 247	0.2417353D-07	0.2417353D-07
ISDGMR: 175	0.2122043D-06	0.2122043D-06	ISDGMR: 248	0.2295910D-07	0.2295910D-07
ISDGMR: 176	0.2044954D-06	0.2044954D-06	ISDGMR: 249	0.2138195D-07	0.2138195D-07
ISDGMR: 177	0.2041038D-06	0.2041038D-06	ISDGMR: 250	0.2009879D-07	0.2009879D-07
ISDGMR: 178	0.2017552D-06	0.2017552D-06	ISDGMR: 251	0.1838152D-07	0.1838152D-07
ISDGMR: 179	0.1948642D-06	0.1948642D-06	ISDGMR: 252	0.1685533D-07	0.1685533D-07

```

ISDGMR: 253 0.1568010D-07 0.1568010D-07
ISDGMR: 254 0.1480453D-07 0.1480453D-07
ISDGMR: 255 0.1390106D-07 0.1390106D-07
ISDGMR: 256 0.1289655D-07 0.1289655D-07
ISDGMR: 257 0.1199299D-07 0.1199299D-07
ISDGMR: 258 0.1157328D-07 0.1157328D-07
ISDGMR: 259 0.1129556D-07 0.1129556D-07
ISDGMR: 260 0.1074926D-07 0.1074926D-07
ISDGMR: 261 0.1041989D-07 0.1041989D-07
ISDGMR: 262 0.9609515D-08 0.9609515D-08
ISDGMR: 263 0.9246465D-08 0.9246465D-08
ISDGMR: 264 0.9167522D-08 0.9167522D-08
ISDGMR: 265 0.9022252D-08 0.9022252D-08
ISDGMR: 266 0.8872085D-08 0.8872085D-08
ISDGMR: 267 0.8184238D-08 0.8184238D-08
ISDGMR: 268 0.7525436D-08 0.7525436D-08
ISDGMR: 269 0.7262462D-08 0.7262462D-08
ISDGMR: 270 0.7010287D-08 0.7010287D-08
ISDGMR: 271 0.6815926D-08 0.6815926D-08
ISDGMR: 272 0.6736750D-08 0.6736750D-08
ISDGMR: 273 0.6639598D-08 0.6639598D-08
ISDGMR: 274 0.6320897D-08 0.6320897D-08
ISDGMR: 275 0.5509157D-08 0.5509157D-08
ISDGMR: 276 0.5395388D-08 0.5395388D-08
ISDGMR: 277 0.5350712D-08 0.5350712D-08
ISDGMR: 278 0.5115600D-08 0.5115600D-08
ISDGMR: 279 0.4522203D-08 0.4522203D-08
ISDGMR: 280 0.4187794D-08 0.4187794D-08
ISDGMR: 281 0.4143970D-08 0.4143970D-08
ISDGMR: 282 0.4120778D-08 0.4120778D-08
ISDGMR: 283 0.4083884D-08 0.4083884D-08
ISDGMR: 284 0.3934496D-08 0.3934496D-08
ISDGMR: 285 0.3683409D-08 0.3683409D-08
ISDGMR: 286 0.3612819D-08 0.3612819D-08
ISDGMR: 287 0.3519956D-08 0.3519956D-08
ISDGMR: 288 0.3493557D-08 0.3493557D-08
ISDGMR: 289 0.3387065D-08 0.3387065D-08
ISDGMR: 290 0.3214586D-08 0.3214586D-08
ISDGMR: 291 0.2966289D-08 0.2966289D-08
ISDGMR: 292 0.2865801D-08 0.2865801D-08
ISDGMR: 293 0.2757174D-08 0.2757174D-08
ISDGMR: 294 0.2723118D-08 0.2723118D-08
ISDGMR: 295 0.2513641D-08 0.2513641D-08
ISDGMR: 296 0.2220208D-08 0.2220208D-08
ISDGMR: 297 0.2189493D-08 0.2189493D-08
ISDGMR: 298 0.2149180D-08 0.2149180D-08
ISDGMR: 299 0.2029125D-08 0.2029125D-08
ISDGMR: 300 0.1893722D-08 0.1893722D-08
ISDGMR: 301 0.1835968D-08 0.1835968D-08
ISDGMR: 302 0.1821317D-08 0.1821317D-08
ISDGMR: 303 0.1806905D-08 0.1806905D-08
ISDGMR: 304 0.1773024D-08 0.1773024D-08
ISDGMR: 305 0.1698219D-08 0.1698219D-08
ISDGMR: 306 0.1626312D-08 0.1626312D-08
ISDGMR: 307 0.1596610D-08 0.1596610D-08
ISDGMR: 308 0.1524172D-08 0.1524172D-08
ISDGMR: 309 0.1321398D-08 0.1321398D-08
ISDGMR: 310 0.1228429D-08 0.1228429D-08
ISDGMR: 311 0.1197127D-08 0.1197127D-08
ISDGMR: 312 0.1150856D-08 0.1150856D-08
ISDGMR: 313 0.1070297D-08 0.1070297D-08
ISDGMR: 314 0.9553213D-09 0.9553213D-09
ISDGMR: 315 0.8352214D-09 0.8352214D-09
ISDGMR: 316 0.6879442D-09 0.6879442D-09
ISDGMR: 317 0.6633819D-09 0.6633819D-09
ISDGMR: 318 0.6606955D-09 0.6606955D-09
ISDGMR: 319 0.6176787D-09 0.6176787D-09
ISDGMR: 320 0.5487673D-09 0.5487673D-09
ISDGMR: 321 0.5418037D-09 0.5418037D-09
ISDGMR: 322 0.5219329D-09 0.5219329D-09
ISDGMR: 323 0.4028298D-09 0.4028298D-09
ISDGMR: 324 0.3729935D-09 0.3729935D-09
ISDGMR: 325 0.3727369D-09 0.3727369D-09
ISDGMR: 326 0.3585158D-09 0.3585158D-09
ISDGMR: 327 0.3390614D-09 0.3390614D-09
ISDGMR: 328 0.3349673D-09 0.3349673D-09
ISDGMR: 329 0.3030774D-09 0.3030774D-09
ISDGMR: 330 0.2039987D-09 0.2039987D-09
ISDGMR: 331 0.1878853D-09 0.1878853D-09
ISDGMR: 332 0.1877221D-09 0.1877221D-09
ISDGMR: 333 0.1784470D-09 0.1784470D-09
ISDGMR: 334 0.1439465D-09 0.1439465D-09
ISDGMR: 335 0.1353879D-09 0.1353879D-09
ISDGMR: 336 0.1314197D-09 0.1314197D-09
ISDGMR: 337 0.1097544D-09 0.1097544D-09
ISDGMR: 338 0.8233112D-10 0.8233112D-10
IErr= 0 Err= 8.23D-11 NSaved= 5 NIter= 338 NITot= 344.
PS= 192.00000000001 PSN= 192.00000000000 RNE=
192.00000000000 Err= 4.44D-16
EnCoef did 100 forward-backward iterations
ItDFit: ISolve= 4 NSavIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=
1000 IStorA=2
Conv0= 2.73D-09 BNorm= 5.00D+03 BPNorm= 7.23D+01
Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10
Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=
744 KMP= 744
Iter Natral Err Est Error Estimate
ISDGMR: 0 0.1737465D-02 0.1737465D-02
ISDGMR: 1 0.1377676D-02 0.1377676D-02
ISDGMR: 2 0.5464342D-03 0.5464342D-03
ISDGMR: 3 0.3031536D-03 0.3031536D-03
ISDGMR: 4 0.2468961D-03 0.2468961D-03
ISDGMR: 5 0.2053158D-03 0.2053158D-03
ISDGMR: 6 0.1793245D-03 0.1793245D-03
ISDGMR: 7 0.1689164D-03 0.1689164D-03
ISDGMR: 8 0.1582521D-03 0.1582521D-03
ISDGMR: 9 0.1487276D-03 0.1487276D-03
ISDGMR: 10 0.1307061D-03 0.1307061D-03
ISDGMR: 11 0.9838571D-04 0.9838571D-04
ISDGMR: 12 0.8117061D-04 0.8117061D-04
ISDGMR: 13 0.6241832D-04 0.6241832D-04
ISDGMR: 14 0.5143057D-04 0.5143057D-04
ISDGMR: 15 0.4111235D-04 0.4111235D-04
ISDGMR: 16 0.3637042D-04 0.3637042D-04
ISDGMR: 17 0.3347113D-04 0.3347113D-04
ISDGMR: 18 0.3171182D-04 0.3171182D-04
ISDGMR: 19 0.2983335D-04 0.2983335D-04
ISDGMR: 20 0.2762652D-04 0.2762652D-04
ISDGMR: 21 0.2597627D-04 0.2597627D-04
ISDGMR: 22 0.2372816D-04 0.2372816D-04
ISDGMR: 23 0.2247057D-04 0.2247057D-04
ISDGMR: 24 0.2019112D-04 0.2019112D-04
ISDGMR: 25 0.1840531D-04 0.1840531D-04
ISDGMR: 26 0.1663830D-04 0.1663830D-04
ISDGMR: 27 0.1472639D-04 0.1472639D-04
ISDGMR: 28 0.1345063D-04 0.1345063D-04
ISDGMR: 29 0.1189240D-04 0.1189240D-04
ISDGMR: 30 0.1104591D-04 0.1104591D-04
ISDGMR: 31 0.1054242D-04 0.1054242D-04
ISDGMR: 32 0.1023470D-04 0.1023470D-04
ISDGMR: 33 0.9857629D-05 0.9857629D-05
ISDGMR: 34 0.9365949D-05 0.9365949D-05
ISDGMR: 35 0.8447159D-05 0.8447159D-05
ISDGMR: 36 0.7634268D-05 0.7634268D-05
ISDGMR: 37 0.6861453D-05 0.6861453D-05
ISDGMR: 38 0.6451266D-05 0.6451266D-05
ISDGMR: 39 0.6252844D-05 0.6252844D-05
ISDGMR: 40 0.6145500D-05 0.6145500D-05
ISDGMR: 41 0.5895239D-05 0.5895239D-05
ISDGMR: 42 0.5388890D-05 0.5388890D-05
ISDGMR: 43 0.4639208D-05 0.4639208D-05
ISDGMR: 44 0.4232705D-05 0.4232705D-05
ISDGMR: 45 0.4055321D-05 0.4055321D-05
ISDGMR: 46 0.3863704D-05 0.3863704D-05
ISDGMR: 47 0.3670351D-05 0.3670351D-05
ISDGMR: 48 0.3426612D-05 0.3426612D-05

```

ISDGMR:	49	0.3233350D-05	0.3233350D-05	ISDGMR:	122	0.2591898D-06	0.2591898D-06
ISDGMR:	50	0.3094389D-05	0.3094389D-05	ISDGMR:	123	0.2549397D-06	0.2549397D-06
ISDGMR:	51	0.2929312D-05	0.2929312D-05	ISDGMR:	124	0.2493527D-06	0.2493527D-06
ISDGMR:	52	0.2772286D-05	0.2772286D-05	ISDGMR:	125	0.2478883D-06	0.2478883D-06
ISDGMR:	53	0.2651576D-05	0.2651576D-05	ISDGMR:	126	0.2413364D-06	0.2413364D-06
ISDGMR:	54	0.2593961D-05	0.2593961D-05	ISDGMR:	127	0.2263519D-06	0.2263519D-06
ISDGMR:	55	0.2466074D-05	0.2466074D-05	ISDGMR:	128	0.2191821D-06	0.2191821D-06
ISDGMR:	56	0.2307026D-05	0.2307026D-05	ISDGMR:	129	0.2118885D-06	0.2118885D-06
ISDGMR:	57	0.2207784D-05	0.2207784D-05	ISDGMR:	130	0.2071036D-06	0.2071036D-06
ISDGMR:	58	0.2152246D-05	0.2152246D-05	ISDGMR:	131	0.2008934D-06	0.2008934D-06
ISDGMR:	59	0.2081808D-05	0.2081808D-05	ISDGMR:	132	0.1918787D-06	0.1918787D-06
ISDGMR:	60	0.1964167D-05	0.1964167D-05	ISDGMR:	133	0.1892711D-06	0.1892711D-06
ISDGMR:	61	0.1915674D-05	0.1915674D-05	ISDGMR:	134	0.1783895D-06	0.1783895D-06
ISDGMR:	62	0.1892600D-05	0.1892600D-05	ISDGMR:	135	0.1714552D-06	0.1714552D-06
ISDGMR:	63	0.1875299D-05	0.1875299D-05	ISDGMR:	136	0.1683841D-06	0.1683841D-06
ISDGMR:	64	0.1864190D-05	0.1864190D-05	ISDGMR:	137	0.1632860D-06	0.1632860D-06
ISDGMR:	65	0.1834207D-05	0.1834207D-05	ISDGMR:	138	0.1574766D-06	0.1574766D-06
ISDGMR:	66	0.1784630D-05	0.1784630D-05	ISDGMR:	139	0.1541739D-06	0.1541739D-06
ISDGMR:	67	0.1727112D-05	0.1727112D-05	ISDGMR:	140	0.1514623D-06	0.1514623D-06
ISDGMR:	68	0.1683466D-05	0.1683466D-05	ISDGMR:	141	0.1494405D-06	0.1494405D-06
ISDGMR:	69	0.1659294D-05	0.1659294D-05	ISDGMR:	142	0.1474740D-06	0.1474740D-06
ISDGMR:	70	0.1646496D-05	0.1646496D-05	ISDGMR:	143	0.1436562D-06	0.1436562D-06
ISDGMR:	71	0.1635220D-05	0.1635220D-05	ISDGMR:	144	0.1424463D-06	0.1424463D-06
ISDGMR:	72	0.1600855D-05	0.1600855D-05	ISDGMR:	145	0.1396865D-06	0.1396865D-06
ISDGMR:	73	0.1504581D-05	0.1504581D-05	ISDGMR:	146	0.1373915D-06	0.1373915D-06
ISDGMR:	74	0.1478706D-05	0.1478706D-05	ISDGMR:	147	0.1330727D-06	0.1330727D-06
ISDGMR:	75	0.1473711D-05	0.1473711D-05	ISDGMR:	148	0.1294292D-06	0.1294292D-06
ISDGMR:	76	0.1470888D-05	0.1470888D-05	ISDGMR:	149	0.1275050D-06	0.1275050D-06
ISDGMR:	77	0.1449832D-05	0.1449832D-05	ISDGMR:	150	0.1240979D-06	0.1240979D-06
ISDGMR:	78	0.1398841D-05	0.1398841D-05	ISDGMR:	151	0.1185361D-06	0.1185361D-06
ISDGMR:	79	0.1365630D-05	0.1365630D-05	ISDGMR:	152	0.1130915D-06	0.1130915D-06
ISDGMR:	80	0.1343478D-05	0.1343478D-05	ISDGMR:	153	0.1069878D-06	0.1069878D-06
ISDGMR:	81	0.1316468D-05	0.1316468D-05	ISDGMR:	154	0.9708052D-07	0.9708052D-07
ISDGMR:	82	0.1285848D-05	0.1285848D-05	ISDGMR:	155	0.9350980D-07	0.9350980D-07
ISDGMR:	83	0.1254389D-05	0.1254389D-05	ISDGMR:	156	0.8744742D-07	0.8744742D-07
ISDGMR:	84	0.1219942D-05	0.1219942D-05	ISDGMR:	157	0.8070960D-07	0.8070960D-07
ISDGMR:	85	0.1186479D-05	0.1186479D-05	ISDGMR:	158	0.7732273D-07	0.7732273D-07
ISDGMR:	86	0.1152322D-05	0.1152322D-05	ISDGMR:	159	0.7560779D-07	0.7560779D-07
ISDGMR:	87	0.1062753D-05	0.1062753D-05	ISDGMR:	160	0.7475245D-07	0.7475245D-07
ISDGMR:	88	0.9589140D-06	0.9589140D-06	ISDGMR:	161	0.7321605D-07	0.7321605D-07
ISDGMR:	89	0.8832647D-06	0.8832647D-06	ISDGMR:	162	0.6944223D-07	0.6944223D-07
ISDGMR:	90	0.8231740D-06	0.8231740D-06	ISDGMR:	163	0.6632746D-07	0.6632746D-07
ISDGMR:	91	0.7981713D-06	0.7981713D-06	ISDGMR:	164	0.6418033D-07	0.6418033D-07
ISDGMR:	92	0.7823766D-06	0.7823766D-06	ISDGMR:	165	0.6148711D-07	0.6148711D-07
ISDGMR:	93	0.7590448D-06	0.7590448D-06	ISDGMR:	166	0.6018248D-07	0.6018248D-07
ISDGMR:	94	0.7226390D-06	0.7226390D-06	ISDGMR:	167	0.5900143D-07	0.5900143D-07
ISDGMR:	95	0.7008028D-06	0.7008028D-06	ISDGMR:	168	0.5760536D-07	0.5760536D-07
ISDGMR:	96	0.6740260D-06	0.6740260D-06	ISDGMR:	169	0.5617848D-07	0.5617848D-07
ISDGMR:	97	0.6209909D-06	0.6209909D-06	ISDGMR:	170	0.5349210D-07	0.5349210D-07
ISDGMR:	98	0.5844828D-06	0.5844828D-06	ISDGMR:	171	0.5008109D-07	0.5008109D-07
ISDGMR:	99	0.5606975D-06	0.5606975D-06	ISDGMR:	172	0.4784699D-07	0.4784699D-07
ISDGMR:	100	0.5522143D-06	0.5522143D-06	ISDGMR:	173	0.4760175D-07	0.4760175D-07
ISDGMR:	101	0.5240534D-06	0.5240534D-06	ISDGMR:	174	0.4733321D-07	0.4733321D-07
ISDGMR:	102	0.5009388D-06	0.5009388D-06	ISDGMR:	175	0.4562066D-07	0.4562066D-07
ISDGMR:	103	0.4761906D-06	0.4761906D-06	ISDGMR:	176	0.4449586D-07	0.4449586D-07
ISDGMR:	104	0.4589162D-06	0.4589162D-06	ISDGMR:	177	0.4168494D-07	0.4168494D-07
ISDGMR:	105	0.4318364D-06	0.4318364D-06	ISDGMR:	178	0.4058529D-07	0.4058529D-07
ISDGMR:	106	0.4111409D-06	0.4111409D-06	ISDGMR:	179	0.4029318D-07	0.4029318D-07
ISDGMR:	107	0.4026736D-06	0.4026736D-06	ISDGMR:	180	0.3998221D-07	0.3998221D-07
ISDGMR:	108	0.3948358D-06	0.3948358D-06	ISDGMR:	181	0.3959866D-07	0.3959866D-07
ISDGMR:	109	0.3838282D-06	0.3838282D-06	ISDGMR:	182	0.3789087D-07	0.3789087D-07
ISDGMR:	110	0.3793473D-06	0.3793473D-06	ISDGMR:	183	0.3675326D-07	0.3675326D-07
ISDGMR:	111	0.3688457D-06	0.3688457D-06	ISDGMR:	184	0.3398009D-07	0.3398009D-07
ISDGMR:	112	0.3510739D-06	0.3510739D-06	ISDGMR:	185	0.3283563D-07	0.3283563D-07
ISDGMR:	113	0.3438179D-06	0.3438179D-06	ISDGMR:	186	0.3225564D-07	0.3225564D-07
ISDGMR:	114	0.3231811D-06	0.3231811D-06	ISDGMR:	187	0.3179369D-07	0.3179369D-07
ISDGMR:	115	0.3086515D-06	0.3086515D-06	ISDGMR:	188	0.3085555D-07	0.3085555D-07
ISDGMR:	116	0.3050789D-06	0.3050789D-06	ISDGMR:	189	0.2936084D-07	0.2936084D-07
ISDGMR:	117	0.2988257D-06	0.2988257D-06	ISDGMR:	190	0.2870311D-07	0.2870311D-07
ISDGMR:	118	0.2898096D-06	0.2898096D-06	ISDGMR:	191	0.2823788D-07	0.2823788D-07
ISDGMR:	119	0.2867487D-06	0.2867487D-06	ISDGMR:	192	0.2731720D-07	0.2731720D-07
ISDGMR:	120	0.2755868D-06	0.2755868D-06	ISDGMR:	193	0.2635256D-07	0.2635256D-07
ISDGMR:	121	0.2664711D-06	0.2664711D-06	ISDGMR:	194	0.2583298D-07	0.2583298D-07

ISDGMR: 195	0.2545786D-07	0.2545786D-07	ISDGMR: 268	0.2390322D-08	0.2390322D-08
ISDGMR: 196	0.2533710D-07	0.2533710D-07	ISDGMR: 269	0.2358583D-08	0.2358583D-08
ISDGMR: 197	0.2532750D-07	0.2532750D-07	ISDGMR: 270	0.2326237D-08	0.2326237D-08
ISDGMR: 198	0.2469945D-07	0.2469945D-07	ISDGMR: 271	0.2291801D-08	0.2291801D-08
ISDGMR: 199	0.2440191D-07	0.2440191D-07	ISDGMR: 272	0.2240709D-08	0.2240709D-08
ISDGMR: 200	0.2418428D-07	0.2418428D-07	ISDGMR: 273	0.2147402D-08	0.2147402D-08
ISDGMR: 201	0.2365628D-07	0.2365628D-07	ISDGMR: 274	0.2036675D-08	0.2036675D-08
ISDGMR: 202	0.2327555D-07	0.2327555D-07	ISDGMR: 275	0.1945227D-08	0.1945227D-08
ISDGMR: 203	0.2315018D-07	0.2315018D-07	ISDGMR: 276	0.1937612D-08	0.1937612D-08
ISDGMR: 204	0.2227013D-07	0.2227013D-07	ISDGMR: 277	0.1901469D-08	0.1901469D-08
ISDGMR: 205	0.2180960D-07	0.2180960D-07	ISDGMR: 278	0.1816834D-08	0.1816834D-08
ISDGMR: 206	0.2090073D-07	0.2090073D-07	ISDGMR: 279	0.1628500D-08	0.1628500D-08
ISDGMR: 207	0.2003033D-07	0.2003033D-07	ISDGMR: 280	0.1569675D-08	0.1569675D-08
ISDGMR: 208	0.1963655D-07	0.1963655D-07	ISDGMR: 281	0.1547682D-08	0.1547682D-08
ISDGMR: 209	0.1861416D-07	0.1861416D-07	ISDGMR: 282	0.1518072D-08	0.1518072D-08
ISDGMR: 210	0.1814171D-07	0.1814171D-07	ISDGMR: 283	0.1456975D-08	0.1456975D-08
ISDGMR: 211	0.1758931D-07	0.1758931D-07	ISDGMR: 284	0.1376698D-08	0.1376698D-08
ISDGMR: 212	0.1710465D-07	0.1710465D-07	ISDGMR: 285	0.1323524D-08	0.1323524D-08
ISDGMR: 213	0.1689086D-07	0.1689086D-07	ISDGMR: 286	0.1232940D-08	0.1232940D-08
ISDGMR: 214	0.1621881D-07	0.1621881D-07	ISDGMR: 287	0.1193908D-08	0.1193908D-08
ISDGMR: 215	0.1584199D-07	0.1584199D-07	ISDGMR: 288	0.1128885D-08	0.1128885D-08
ISDGMR: 216	0.1545407D-07	0.1545407D-07	ISDGMR: 289	0.9494757D-09	0.9494757D-09
ISDGMR: 217	0.1453226D-07	0.1453226D-07	ISDGMR: 290	0.7822649D-09	0.7822649D-09
ISDGMR: 218	0.1444276D-07	0.1444276D-07	ISDGMR: 291	0.6876401D-09	0.6876401D-09
ISDGMR: 219	0.1377251D-07	0.1377251D-07	ISDGMR: 292	0.6427548D-09	0.6427548D-09
ISDGMR: 220	0.1297605D-07	0.1297605D-07	ISDGMR: 293	0.6242967D-09	0.6242967D-09
ISDGMR: 221	0.1246725D-07	0.1246725D-07	ISDGMR: 294	0.5828986D-09	0.5828986D-09
ISDGMR: 222	0.1179570D-07	0.1179570D-07	ISDGMR: 295	0.4704241D-09	0.4704241D-09
ISDGMR: 223	0.1149760D-07	0.1149760D-07	ISDGMR: 296	0.3550222D-09	0.3550222D-09
ISDGMR: 224	0.1130882D-07	0.1130882D-07	ISDGMR: 297	0.3449004D-09	0.3449004D-09
ISDGMR: 225	0.1086236D-07	0.1086236D-07	ISDGMR: 298	0.3395166D-09	0.3395166D-09
ISDGMR: 226	0.1059950D-07	0.1059950D-07	ISDGMR: 299	0.3238522D-09	0.3238522D-09
ISDGMR: 227	0.9813499D-08	0.9813499D-08	ISDGMR: 300	0.3065279D-09	0.3065279D-09
ISDGMR: 228	0.9655974D-08	0.9655974D-08	ISDGMR: 301	0.2847393D-09	0.2847393D-09
ISDGMR: 229	0.9451492D-08	0.9451492D-08	ISDGMR: 302	0.2746929D-09	0.2746929D-09
ISDGMR: 230	0.9295497D-08	0.9295497D-08	ISDGMR: 303	0.2698745D-09	0.2698745D-09
ISDGMR: 231	0.9036965D-08	0.9036965D-08	ISDGMR: 304	0.2690964D-09	0.2690964D-09
ISDGMR: 232	0.8690607D-08	0.8690607D-08	ISDGMR: 305	0.2603486D-09	0.2603486D-09
ISDGMR: 233	0.8198633D-08	0.8198633D-08	ISDGMR: 306	0.2560561D-09	0.2560561D-09
ISDGMR: 234	0.7942126D-08	0.7942126D-08	ISDGMR: 307	0.2553324D-09	0.2553324D-09
ISDGMR: 235	0.7918247D-08	0.7918247D-08	ISDGMR: 308	0.2513942D-09	0.2513942D-09
ISDGMR: 236	0.7658245D-08	0.7658245D-08	ISDGMR: 309	0.2386814D-09	0.2386814D-09
ISDGMR: 237	0.7529249D-08	0.7529249D-08	ISDGMR: 310	0.2210555D-09	0.2210555D-09
ISDGMR: 238	0.7164775D-08	0.7164775D-08	ISDGMR: 311	0.2194050D-09	0.2194050D-09
ISDGMR: 239	0.6807847D-08	0.6807847D-08	ISDGMR: 312	0.2154261D-09	0.2154261D-09
ISDGMR: 240	0.6627225D-08	0.6627225D-08	ISDGMR: 313	0.2096367D-09	0.2096367D-09
ISDGMR: 241	0.6497036D-08	0.6497036D-08	ISDGMR: 314	0.1845741D-09	0.1845741D-09
ISDGMR: 242	0.6356281D-08	0.6356281D-08	ISDGMR: 315	0.1563164D-09	0.1563164D-09
ISDGMR: 243	0.6102481D-08	0.6102481D-08	ISDGMR: 316	0.1484609D-09	0.1484609D-09
ISDGMR: 244	0.5676917D-08	0.5676917D-08	ISDGMR: 317	0.1448890D-09	0.1448890D-09
ISDGMR: 245	0.5572338D-08	0.5572338D-08	ISDGMR: 318	0.1401595D-09	0.1401595D-09
ISDGMR: 246	0.5399379D-08	0.5399379D-08	ISDGMR: 319	0.1114616D-09	0.1114616D-09
ISDGMR: 247	0.5293749D-08	0.5293749D-08	ISDGMR: 320	0.9644919D-10	0.9644919D-10
ISDGMR: 248	0.5041959D-08	0.5041959D-08	IErr=	0 Err= 9.64D-11 NSaved=	6 NIter= 320 NITot= 327.
ISDGMR: 249	0.4733118D-08	0.4733118D-08	PS=	192.000000000000	PSN= 192.000000000000 RNE=
ISDGMR: 250	0.4466875D-08	0.4466875D-08		192.000000000000	Err=-1.48D-16
ISDGMR: 251	0.4258264D-08	0.4258264D-08	EnCoef did	3 forward-backward iterations	
ISDGMR: 252	0.4081159D-08	0.4081159D-08	ItDFit: ISolve=	4 NSavIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=	
ISDGMR: 253	0.4047279D-08	0.4047279D-08	1000 IStorA=	2	
ISDGMR: 254	0.3952685D-08	0.3952685D-08	Conv0=	2.73D-09 BNorm= 4.64D+03 BPNorm= 6.97D+01	
ISDGMR: 255	0.3824884D-08	0.3824884D-08	Conv=	1.00D-10 AccInt= 1.00D-10	
ISDGMR: 256	0.3616004D-08	0.3616004D-08	Generalized Minimum Residual for N=	744 ITol= 0 MaxL=	
ISDGMR: 257	0.3449429D-08	0.3449429D-08	744 KMP=	744	
ISDGMR: 258	0.3430132D-08	0.3430132D-08	Iter	Natral Err Est Error Estimate	
ISDGMR: 259	0.3394471D-08	0.3394471D-08	ISDGMR: 0	0.3307024D-02	0.3307024D-02
ISDGMR: 260	0.3243545D-08	0.3243545D-08	ISDGMR: 1	0.2768938D-02	0.2768938D-02
ISDGMR: 261	0.3043769D-08	0.3043769D-08	ISDGMR: 2	0.1114954D-02	0.1114954D-02
ISDGMR: 262	0.2837175D-08	0.2837175D-08	ISDGMR: 3	0.6489678D-03	0.6489678D-03
ISDGMR: 263	0.2744814D-08	0.2744814D-08	ISDGMR: 4	0.5520363D-03	0.5520363D-03
ISDGMR: 264	0.2691695D-08	0.2691695D-08	ISDGMR: 5	0.5163732D-03	0.5163732D-03
ISDGMR: 265	0.2648360D-08	0.2648360D-08	ISDGMR: 6	0.4825950D-03	0.4825950D-03
ISDGMR: 266	0.2599614D-08	0.2599614D-08	ISDGMR: 7	0.4472689D-03	0.4472689D-03
ISDGMR: 267	0.2449099D-08	0.2449099D-08	ISDGMR: 8	0.3981835D-03	0.3981835D-03

ISDGMR:	9	0.3435142D-03	0.3435142D-03	ISDGMR:	82	0.6734594D-05	0.6734594D-05
ISDGMR:	10	0.3049270D-03	0.3049270D-03	ISDGMR:	83	0.6163150D-05	0.6163150D-05
ISDGMR:	11	0.2331097D-03	0.2331097D-03	ISDGMR:	84	0.5874191D-05	0.5874191D-05
ISDGMR:	12	0.1994045D-03	0.1994045D-03	ISDGMR:	85	0.5714659D-05	0.5714659D-05
ISDGMR:	13	0.1480691D-03	0.1480691D-03	ISDGMR:	86	0.5421064D-05	0.5421064D-05
ISDGMR:	14	0.1307439D-03	0.1307439D-03	ISDGMR:	87	0.5060348D-05	0.5060348D-05
ISDGMR:	15	0.1057146D-03	0.1057146D-03	ISDGMR:	88	0.4670082D-05	0.4670082D-05
ISDGMR:	16	0.9102744D-04	0.9102744D-04	ISDGMR:	89	0.4384578D-05	0.4384578D-05
ISDGMR:	17	0.8094736D-04	0.8094736D-04	ISDGMR:	90	0.4087995D-05	0.4087995D-05
ISDGMR:	18	0.6751748D-04	0.6751748D-04	ISDGMR:	91	0.3785211D-05	0.3785211D-05
ISDGMR:	19	0.5658372D-04	0.5658372D-04	ISDGMR:	92	0.3515781D-05	0.3515781D-05
ISDGMR:	20	0.5445617D-04	0.5445617D-04	ISDGMR:	93	0.3366992D-05	0.3366992D-05
ISDGMR:	21	0.5233064D-04	0.5233064D-04	ISDGMR:	94	0.3192219D-05	0.3192219D-05
ISDGMR:	22	0.4504893D-04	0.4504893D-04	ISDGMR:	95	0.3065140D-05	0.3065140D-05
ISDGMR:	23	0.4111932D-04	0.4111932D-04	ISDGMR:	96	0.2893768D-05	0.2893768D-05
ISDGMR:	24	0.3933471D-04	0.3933471D-04	ISDGMR:	97	0.2670999D-05	0.2670999D-05
ISDGMR:	25	0.3750418D-04	0.3750418D-04	ISDGMR:	98	0.2460384D-05	0.2460384D-05
ISDGMR:	26	0.3529275D-04	0.3529275D-04	ISDGMR:	99	0.2324975D-05	0.2324975D-05
ISDGMR:	27	0.3306026D-04	0.3306026D-04	ISDGMR:	100	0.2198036D-05	0.2198036D-05
ISDGMR:	28	0.3188603D-04	0.3188603D-04	ISDGMR:	101	0.2114993D-05	0.2114993D-05
ISDGMR:	29	0.2954769D-04	0.2954769D-04	ISDGMR:	102	0.2033787D-05	0.2033787D-05
ISDGMR:	30	0.2692217D-04	0.2692217D-04	ISDGMR:	103	0.1937162D-05	0.1937162D-05
ISDGMR:	31	0.2590371D-04	0.2590371D-04	ISDGMR:	104	0.1856455D-05	0.1856455D-05
ISDGMR:	32	0.2569615D-04	0.2569615D-04	ISDGMR:	105	0.1762735D-05	0.1762735D-05
ISDGMR:	33	0.2497283D-04	0.2497283D-04	ISDGMR:	106	0.1713857D-05	0.1713857D-05
ISDGMR:	34	0.2325716D-04	0.2325716D-04	ISDGMR:	107	0.1675208D-05	0.1675208D-05
ISDGMR:	35	0.2120589D-04	0.2120589D-04	ISDGMR:	108	0.1616093D-05	0.1616093D-05
ISDGMR:	36	0.2024756D-04	0.2024756D-04	ISDGMR:	109	0.1536374D-05	0.1536374D-05
ISDGMR:	37	0.1951415D-04	0.1951415D-04	ISDGMR:	110	0.1523431D-05	0.1523431D-05
ISDGMR:	38	0.1904049D-04	0.1904049D-04	ISDGMR:	111	0.1516121D-05	0.1516121D-05
ISDGMR:	39	0.1888931D-04	0.1888931D-04	ISDGMR:	112	0.1468662D-05	0.1468662D-05
ISDGMR:	40	0.1858170D-04	0.1858170D-04	ISDGMR:	113	0.1454201D-05	0.1454201D-05
ISDGMR:	41	0.1775718D-04	0.1775718D-04	ISDGMR:	114	0.1422423D-05	0.1422423D-05
ISDGMR:	42	0.1695044D-04	0.1695044D-04	ISDGMR:	115	0.1395825D-05	0.1395825D-05
ISDGMR:	43	0.1666079D-04	0.1666079D-04	ISDGMR:	116	0.1366239D-05	0.1366239D-05
ISDGMR:	44	0.1653382D-04	0.1653382D-04	ISDGMR:	117	0.1350851D-05	0.1350851D-05
ISDGMR:	45	0.1598823D-04	0.1598823D-04	ISDGMR:	118	0.1329474D-05	0.1329474D-05
ISDGMR:	46	0.1542297D-04	0.1542297D-04	ISDGMR:	119	0.1326803D-05	0.1326803D-05
ISDGMR:	47	0.1515358D-04	0.1515358D-04	ISDGMR:	120	0.1305577D-05	0.1305577D-05
ISDGMR:	48	0.1495633D-04	0.1495633D-04	ISDGMR:	121	0.1292890D-05	0.1292890D-05
ISDGMR:	49	0.1457053D-04	0.1457053D-04	ISDGMR:	122	0.1278900D-05	0.1278900D-05
ISDGMR:	50	0.1429290D-04	0.1429290D-04	ISDGMR:	123	0.1266584D-05	0.1266584D-05
ISDGMR:	51	0.1398438D-04	0.1398438D-04	ISDGMR:	124	0.1255117D-05	0.1255117D-05
ISDGMR:	52	0.1358667D-04	0.1358667D-04	ISDGMR:	125	0.1249292D-05	0.1249292D-05
ISDGMR:	53	0.1325603D-04	0.1325603D-04	ISDGMR:	126	0.1224765D-05	0.1224765D-05
ISDGMR:	54	0.1321912D-04	0.1321912D-04	ISDGMR:	127	0.1182252D-05	0.1182252D-05
ISDGMR:	55	0.1321824D-04	0.1321824D-04	ISDGMR:	128	0.1151893D-05	0.1151893D-05
ISDGMR:	56	0.1321132D-04	0.1321132D-04	ISDGMR:	129	0.1113636D-05	0.1113636D-05
ISDGMR:	57	0.1303760D-04	0.1303760D-04	ISDGMR:	130	0.1090298D-05	0.1090298D-05
ISDGMR:	58	0.1238448D-04	0.1238448D-04	ISDGMR:	131	0.1042403D-05	0.1042403D-05
ISDGMR:	59	0.1202555D-04	0.1202555D-04	ISDGMR:	132	0.1025888D-05	0.1025888D-05
ISDGMR:	60	0.1191226D-04	0.1191226D-04	ISDGMR:	133	0.9606934D-06	0.9606934D-06
ISDGMR:	61	0.1189306D-04	0.1189306D-04	ISDGMR:	134	0.9009458D-06	0.9009458D-06
ISDGMR:	62	0.1179524D-04	0.1179524D-04	ISDGMR:	135	0.8593283D-06	0.8593283D-06
ISDGMR:	63	0.1152597D-04	0.1152597D-04	ISDGMR:	136	0.8211200D-06	0.8211200D-06
ISDGMR:	64	0.1143364D-04	0.1143364D-04	ISDGMR:	137	0.7662074D-06	0.7662074D-06
ISDGMR:	65	0.1130192D-04	0.1130192D-04	ISDGMR:	138	0.7451038D-06	0.7451038D-06
ISDGMR:	66	0.1108138D-04	0.1108138D-04	ISDGMR:	139	0.7190673D-06	0.7190673D-06
ISDGMR:	67	0.1084818D-04	0.1084818D-04	ISDGMR:	140	0.6954973D-06	0.6954973D-06
ISDGMR:	68	0.1076694D-04	0.1076694D-04	ISDGMR:	141	0.6822598D-06	0.6822598D-06
ISDGMR:	69	0.1074295D-04	0.1074295D-04	ISDGMR:	142	0.6738320D-06	0.6738320D-06
ISDGMR:	70	0.1065618D-04	0.1065618D-04	ISDGMR:	143	0.6522273D-06	0.6522273D-06
ISDGMR:	71	0.1033942D-04	0.1033942D-04	ISDGMR:	144	0.6421572D-06	0.6421572D-06
ISDGMR:	72	0.1002177D-04	0.1002177D-04	ISDGMR:	145	0.6380294D-06	0.6380294D-06
ISDGMR:	73	0.9748681D-05	0.9748681D-05	ISDGMR:	146	0.6258909D-06	0.6258909D-06
ISDGMR:	74	0.9718014D-05	0.9718014D-05	ISDGMR:	147	0.5994311D-06	0.5994311D-06
ISDGMR:	75	0.9387765D-05	0.9387765D-05	ISDGMR:	148	0.5710292D-06	0.5710292D-06
ISDGMR:	76	0.8853147D-05	0.8853147D-05	ISDGMR:	149	0.5579250D-06	0.5579250D-06
ISDGMR:	77	0.8547841D-05	0.8547841D-05	ISDGMR:	150	0.5519606D-06	0.5519606D-06
ISDGMR:	78	0.8485347D-05	0.8485347D-05	ISDGMR:	151	0.5505177D-06	0.5505177D-06
ISDGMR:	79	0.8109932D-05	0.8109932D-05	ISDGMR:	152	0.5469373D-06	0.5469373D-06
ISDGMR:	80	0.7593811D-05	0.7593811D-05	ISDGMR:	153	0.5228695D-06	0.5228695D-06
ISDGMR:	81	0.7171396D-05	0.7171396D-05	ISDGMR:	154	0.5120865D-06	0.5120865D-06

ISDGMR: 155	0.4760941D-06	0.4760941D-06	ISDGMR: 228	0.4540717D-07	0.4540717D-07
ISDGMR: 156	0.4555674D-06	0.4555674D-06	ISDGMR: 229	0.4330925D-07	0.4330925D-07
ISDGMR: 157	0.4420096D-06	0.4420096D-06	ISDGMR: 230	0.4279285D-07	0.4279285D-07
ISDGMR: 158	0.4323217D-06	0.4323217D-06	ISDGMR: 231	0.4224391D-07	0.4224391D-07
ISDGMR: 159	0.4185827D-06	0.4185827D-06	ISDGMR: 232	0.4019207D-07	0.4019207D-07
ISDGMR: 160	0.4079928D-06	0.4079928D-06	ISDGMR: 233	0.3509905D-07	0.3509905D-07
ISDGMR: 161	0.3997707D-06	0.3997707D-06	ISDGMR: 234	0.3331560D-07	0.3331560D-07
ISDGMR: 162	0.3901702D-06	0.3901702D-06	ISDGMR: 235	0.3287363D-07	0.3287363D-07
ISDGMR: 163	0.3813505D-06	0.3813505D-06	ISDGMR: 236	0.3256615D-07	0.3256615D-07
ISDGMR: 164	0.3705319D-06	0.3705319D-06	ISDGMR: 237	0.3135852D-07	0.3135852D-07
ISDGMR: 165	0.3606899D-06	0.3606899D-06	ISDGMR: 238	0.2951375D-07	0.2951375D-07
ISDGMR: 166	0.3576566D-06	0.3576566D-06	ISDGMR: 239	0.2896225D-07	0.2896225D-07
ISDGMR: 167	0.3505105D-06	0.3505105D-06	ISDGMR: 240	0.2829102D-07	0.2829102D-07
ISDGMR: 168	0.3464782D-06	0.3464782D-06	ISDGMR: 241	0.2794141D-07	0.2794141D-07
ISDGMR: 169	0.3428192D-06	0.3428192D-06	ISDGMR: 242	0.2726869D-07	0.2726869D-07
ISDGMR: 170	0.3253231D-06	0.3253231D-06	ISDGMR: 243	0.2718042D-07	0.2718042D-07
ISDGMR: 171	0.3117942D-06	0.3117942D-06	ISDGMR: 244	0.2696973D-07	0.2696973D-07
ISDGMR: 172	0.3020111D-06	0.3020111D-06	ISDGMR: 245	0.2642984D-07	0.2642984D-07
ISDGMR: 173	0.2990066D-06	0.2990066D-06	ISDGMR: 246	0.2528238D-07	0.2528238D-07
ISDGMR: 174	0.2950908D-06	0.2950908D-06	ISDGMR: 247	0.2481977D-07	0.2481977D-07
ISDGMR: 175	0.2883892D-06	0.2883892D-06	ISDGMR: 248	0.2419363D-07	0.2419363D-07
ISDGMR: 176	0.2797158D-06	0.2797158D-06	ISDGMR: 249	0.2291059D-07	0.2291059D-07
ISDGMR: 177	0.2722594D-06	0.2722594D-06	ISDGMR: 250	0.2110019D-07	0.2110019D-07
ISDGMR: 178	0.2650434D-06	0.2650434D-06	ISDGMR: 251	0.1945094D-07	0.1945094D-07
ISDGMR: 179	0.2551593D-06	0.2551593D-06	ISDGMR: 252	0.1884921D-07	0.1884921D-07
ISDGMR: 180	0.2517025D-06	0.2517025D-06	ISDGMR: 253	0.1864902D-07	0.1864902D-07
ISDGMR: 181	0.2470011D-06	0.2470011D-06	ISDGMR: 254	0.1835942D-07	0.1835942D-07
ISDGMR: 182	0.2406088D-06	0.2406088D-06	ISDGMR: 255	0.1715941D-07	0.1715941D-07
ISDGMR: 183	0.2237618D-06	0.2237618D-06	ISDGMR: 256	0.1552835D-07	0.1552835D-07
ISDGMR: 184	0.2036966D-06	0.2036966D-06	ISDGMR: 257	0.1367214D-07	0.1367214D-07
ISDGMR: 185	0.1903031D-06	0.1903031D-06	ISDGMR: 258	0.1293496D-07	0.1293496D-07
ISDGMR: 186	0.1857790D-06	0.1857790D-06	ISDGMR: 259	0.1287307D-07	0.1287307D-07
ISDGMR: 187	0.1785151D-06	0.1785151D-06	ISDGMR: 260	0.1266221D-07	0.1266221D-07
ISDGMR: 188	0.1607851D-06	0.1607851D-06	ISDGMR: 261	0.1250707D-07	0.1250707D-07
ISDGMR: 189	0.1534938D-06	0.1534938D-06	ISDGMR: 262	0.1211259D-07	0.1211259D-07
ISDGMR: 190	0.1473132D-06	0.1473132D-06	ISDGMR: 263	0.1104437D-07	0.1104437D-07
ISDGMR: 191	0.1379391D-06	0.1379391D-06	ISDGMR: 264	0.1002756D-07	0.1002756D-07
ISDGMR: 192	0.1323368D-06	0.1323368D-06	ISDGMR: 265	0.9951260D-08	0.9951260D-08
ISDGMR: 193	0.1281965D-06	0.1281965D-06	ISDGMR: 266	0.9902713D-08	0.9902713D-08
ISDGMR: 194	0.1202894D-06	0.1202894D-06	ISDGMR: 267	0.8892808D-08	0.8892808D-08
ISDGMR: 195	0.1174023D-06	0.1174023D-06	ISDGMR: 268	0.8213703D-08	0.8213703D-08
ISDGMR: 196	0.1132203D-06	0.1132203D-06	ISDGMR: 269	0.7911540D-08	0.7911540D-08
ISDGMR: 197	0.1099780D-06	0.1099780D-06	ISDGMR: 270	0.7571206D-08	0.7571206D-08
ISDGMR: 198	0.1088060D-06	0.1088060D-06	ISDGMR: 271	0.7448249D-08	0.7448249D-08
ISDGMR: 199	0.1017005D-06	0.1017005D-06	ISDGMR: 272	0.6835930D-08	0.6835930D-08
ISDGMR: 200	0.1006005D-06	0.1006005D-06	ISDGMR: 273	0.6408964D-08	0.6408964D-08
ISDGMR: 201	0.9758577D-07	0.9758577D-07	ISDGMR: 274	0.6143793D-08	0.6143793D-08
ISDGMR: 202	0.9482233D-07	0.9482233D-07	ISDGMR: 275	0.6051466D-08	0.6051466D-08
ISDGMR: 203	0.9244357D-07	0.9244357D-07	ISDGMR: 276	0.5948793D-08	0.5948793D-08
ISDGMR: 204	0.8990652D-07	0.8990652D-07	ISDGMR: 277	0.5867249D-08	0.5867249D-08
ISDGMR: 205	0.8693345D-07	0.8693345D-07	ISDGMR: 278	0.5707945D-08	0.5707945D-08
ISDGMR: 206	0.8571239D-07	0.8571239D-07	ISDGMR: 279	0.5207006D-08	0.5207006D-08
ISDGMR: 207	0.8442734D-07	0.8442734D-07	ISDGMR: 280	0.5087204D-08	0.5087204D-08
ISDGMR: 208	0.8317249D-07	0.8317249D-07	ISDGMR: 281	0.4958659D-08	0.4958659D-08
ISDGMR: 209	0.8297138D-07	0.8297138D-07	ISDGMR: 282	0.4922888D-08	0.4922888D-08
ISDGMR: 210	0.8122837D-07	0.8122837D-07	ISDGMR: 283	0.4894423D-08	0.4894423D-08
ISDGMR: 211	0.7915478D-07	0.7915478D-07	ISDGMR: 284	0.4565281D-08	0.4565281D-08
ISDGMR: 212	0.7860621D-07	0.7860621D-07	ISDGMR: 285	0.4149990D-08	0.4149990D-08
ISDGMR: 213	0.7688749D-07	0.7688749D-07	ISDGMR: 286	0.4064261D-08	0.4064261D-08
ISDGMR: 214	0.7477589D-07	0.7477589D-07	ISDGMR: 287	0.4040655D-08	0.4040655D-08
ISDGMR: 215	0.7351407D-07	0.7351407D-07	ISDGMR: 288	0.4038832D-08	0.4038832D-08
ISDGMR: 216	0.6992873D-07	0.6992873D-07	ISDGMR: 289	0.3962764D-08	0.3962764D-08
ISDGMR: 217	0.6826548D-07	0.6826548D-07	ISDGMR: 290	0.3821027D-08	0.3821027D-08
ISDGMR: 218	0.6684425D-07	0.6684425D-07	ISDGMR: 291	0.3676406D-08	0.3676406D-08
ISDGMR: 219	0.6539622D-07	0.6539622D-07	ISDGMR: 292	0.3628427D-08	0.3628427D-08
ISDGMR: 220	0.6235868D-07	0.6235868D-07	ISDGMR: 293	0.3596170D-08	0.3596170D-08
ISDGMR: 221	0.5985127D-07	0.5985127D-07	ISDGMR: 294	0.3239680D-08	0.3239680D-08
ISDGMR: 222	0.5905775D-07	0.5905775D-07	ISDGMR: 295	0.2892052D-08	0.2892052D-08
ISDGMR: 223	0.5754096D-07	0.5754096D-07	ISDGMR: 296	0.2627663D-08	0.2627663D-08
ISDGMR: 224	0.5401610D-07	0.5401610D-07	ISDGMR: 297	0.2521286D-08	0.2521286D-08
ISDGMR: 225	0.5250861D-07	0.5250861D-07	ISDGMR: 298	0.2477663D-08	0.2477663D-08
ISDGMR: 226	0.5107767D-07	0.5107767D-07	ISDGMR: 299	0.2407892D-08	0.2407892D-08
ISDGMR: 227	0.4723475D-07	0.4723475D-07	ISDGMR: 300	0.2340517D-08	0.2340517D-08

```

ISDGMR: 301 0.2011296D-08 0.2011296D-08
ISDGMR: 302 0.1945877D-08 0.1945877D-08
ISDGMR: 303 0.1936022D-08 0.1936022D-08
ISDGMR: 304 0.1895751D-08 0.1895751D-08
ISDGMR: 305 0.1812663D-08 0.1812663D-08
ISDGMR: 306 0.1596781D-08 0.1596781D-08
ISDGMR: 307 0.1577307D-08 0.1577307D-08
ISDGMR: 308 0.1528209D-08 0.1528209D-08
ISDGMR: 309 0.1354732D-08 0.1354732D-08
ISDGMR: 310 0.1259859D-08 0.1259859D-08
ISDGMR: 311 0.1172966D-08 0.1172966D-08
ISDGMR: 312 0.1102167D-08 0.1102167D-08
ISDGMR: 313 0.1075652D-08 0.1075652D-08
ISDGMR: 314 0.1031545D-08 0.1031545D-08
ISDGMR: 315 0.8700875D-09 0.8700875D-09
ISDGMR: 316 0.7480559D-09 0.7480559D-09
ISDGMR: 317 0.7295475D-09 0.7295475D-09
ISDGMR: 318 0.7253827D-09 0.7253827D-09
ISDGMR: 319 0.7021325D-09 0.7021325D-09
ISDGMR: 320 0.6416893D-09 0.6416893D-09
ISDGMR: 321 0.6351487D-09 0.6351487D-09
ISDGMR: 322 0.5940566D-09 0.5940566D-09
ISDGMR: 323 0.4606945D-09 0.4606945D-09
ISDGMR: 324 0.4504079D-09 0.4504079D-09
ISDGMR: 325 0.4474008D-09 0.4474008D-09
ISDGMR: 326 0.3890329D-09 0.3890329D-09
ISDGMR: 327 0.3253683D-09 0.3253683D-09
ISDGMR: 328 0.3133929D-09 0.3133929D-09
ISDGMR: 329 0.3033355D-09 0.3033355D-09
ISDGMR: 330 0.2179505D-09 0.2179505D-09
ISDGMR: 331 0.1816817D-09 0.1816817D-09
ISDGMR: 332 0.1804934D-09 0.1804934D-09
ISDGMR: 333 0.1665988D-09 0.1665988D-09
ISDGMR: 334 0.1354907D-09 0.1354907D-09
ISDGMR: 335 0.1317009D-09 0.1317009D-09
ISDGMR: 336 0.1295902D-09 0.1295902D-09
ISDGMR: 337 0.1057953D-09 0.1057953D-09
ISDGMR: 338 0.7416478D-10 0.7416478D-10
IErr= 0 Err= 7.42D-11 NSaved= 6 NIter= 338 NITot= 345.
PS= 192.000000000001 PSN= 192.000000000000 RNE=
192.000000000000 Err= 1.48D-16
EnCoef did 3 forward-backward iterations
ItDFit: ISolve= 4 NSavIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=
1000 IStorA=2
Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.75D+03 BPNorm= 7.05D+01
Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10
Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=
744 KMP= 744
Iter Natral Err Est Error Estimate
ISDGMR: 0 0.1308259D-02 0.1308259D-02
ISDGMR: 1 0.9838914D-03 0.9838914D-03
ISDGMR: 2 0.4448180D-03 0.4448180D-03
ISDGMR: 3 0.2445103D-03 0.2445103D-03
ISDGMR: 4 0.1970705D-03 0.1970705D-03
ISDGMR: 5 0.1625181D-03 0.1625181D-03
ISDGMR: 6 0.1507905D-03 0.1507905D-03
ISDGMR: 7 0.1452066D-03 0.1452066D-03
ISDGMR: 8 0.1396961D-03 0.1396961D-03
ISDGMR: 9 0.1290892D-03 0.1290892D-03
ISDGMR: 10 0.1106360D-03 0.1106360D-03
ISDGMR: 11 0.8679840D-04 0.8679840D-04
ISDGMR: 12 0.6482337D-04 0.6482337D-04
ISDGMR: 13 0.4930604D-04 0.4930604D-04
ISDGMR: 14 0.4137396D-04 0.4137396D-04
ISDGMR: 15 0.3489063D-04 0.3489063D-04
ISDGMR: 16 0.3141521D-04 0.3141521D-04
ISDGMR: 17 0.2791648D-04 0.2791648D-04
ISDGMR: 18 0.2578794D-04 0.2578794D-04
ISDGMR: 19 0.2314563D-04 0.2314563D-04
ISDGMR: 20 0.2229471D-04 0.2229471D-04
ISDGMR: 21 0.2082799D-04 0.2082799D-04
ISDGMR: 22 0.1988978D-04 0.1988978D-04
ISDGMR: 23 0.1887726D-04 0.1887726D-04
ISDGMR: 24 0.1776190D-04 0.1776190D-04
ISDGMR: 25 0.1585532D-04 0.1585532D-04
ISDGMR: 26 0.1390292D-04 0.1390292D-04
ISDGMR: 27 0.1253266D-04 0.1253266D-04
ISDGMR: 28 0.1149293D-04 0.1149293D-04
ISDGMR: 29 0.1072602D-04 0.1072602D-04
ISDGMR: 30 0.1023587D-04 0.1023587D-04
ISDGMR: 31 0.9688744D-05 0.9688744D-05
ISDGMR: 32 0.9267094D-05 0.9267094D-05
ISDGMR: 33 0.8610070D-05 0.8610070D-05
ISDGMR: 34 0.8106437D-05 0.8106437D-05
ISDGMR: 35 0.7611552D-05 0.7611552D-05
ISDGMR: 36 0.7054681D-05 0.7054681D-05
ISDGMR: 37 0.6922423D-05 0.6922423D-05
ISDGMR: 38 0.6914072D-05 0.6914072D-05
ISDGMR: 39 0.6854818D-05 0.6854818D-05
ISDGMR: 40 0.6560390D-05 0.6560390D-05
ISDGMR: 41 0.6087624D-05 0.6087624D-05
ISDGMR: 42 0.5730039D-05 0.5730039D-05
ISDGMR: 43 0.5649783D-05 0.5649783D-05
ISDGMR: 44 0.5647550D-05 0.5647550D-05
ISDGMR: 45 0.5578305D-05 0.5578305D-05
ISDGMR: 46 0.5357232D-05 0.5357232D-05
ISDGMR: 47 0.5214775D-05 0.5214775D-05
ISDGMR: 48 0.5095192D-05 0.5095192D-05
ISDGMR: 49 0.5079814D-05 0.5079814D-05
ISDGMR: 50 0.5055657D-05 0.5055657D-05
ISDGMR: 51 0.5045894D-05 0.5045894D-05
ISDGMR: 52 0.5016687D-05 0.5016687D-05
ISDGMR: 53 0.4832008D-05 0.4832008D-05
ISDGMR: 54 0.4754039D-05 0.4754039D-05
ISDGMR: 55 0.4714062D-05 0.4714062D-05
ISDGMR: 56 0.4603571D-05 0.4603571D-05
ISDGMR: 57 0.4525111D-05 0.4525111D-05
ISDGMR: 58 0.4460752D-05 0.4460752D-05
ISDGMR: 59 0.4447788D-05 0.4447788D-05
ISDGMR: 60 0.4415147D-05 0.4415147D-05
ISDGMR: 61 0.4181623D-05 0.4181623D-05
ISDGMR: 62 0.4094873D-05 0.4094873D-05
ISDGMR: 63 0.4094852D-05 0.4094852D-05
ISDGMR: 64 0.4063823D-05 0.4063823D-05
ISDGMR: 65 0.3999140D-05 0.3999140D-05
ISDGMR: 66 0.3942397D-05 0.3942397D-05
ISDGMR: 67 0.3889415D-05 0.3889415D-05
ISDGMR: 68 0.3849811D-05 0.3849811D-05
ISDGMR: 69 0.3733292D-05 0.3733292D-05
ISDGMR: 70 0.3644044D-05 0.3644044D-05
ISDGMR: 71 0.3612140D-05 0.3612140D-05
ISDGMR: 72 0.3533634D-05 0.3533634D-05
ISDGMR: 73 0.3496581D-05 0.3496581D-05
ISDGMR: 74 0.3389895D-05 0.3389895D-05
ISDGMR: 75 0.3360496D-05 0.3360496D-05
ISDGMR: 76 0.3270300D-05 0.3270300D-05
ISDGMR: 77 0.3164272D-05 0.3164272D-05
ISDGMR: 78 0.3076832D-05 0.3076832D-05
ISDGMR: 79 0.2948858D-05 0.2948858D-05
ISDGMR: 80 0.2759538D-05 0.2759538D-05
ISDGMR: 81 0.2649327D-05 0.2649327D-05
ISDGMR: 82 0.2511292D-05 0.2511292D-05
ISDGMR: 83 0.2399119D-05 0.2399119D-05
ISDGMR: 84 0.2317895D-05 0.2317895D-05
ISDGMR: 85 0.2197602D-05 0.2197602D-05
ISDGMR: 86 0.2074983D-05 0.2074983D-05
ISDGMR: 87 0.1969382D-05 0.1969382D-05
ISDGMR: 88 0.1798280D-05 0.1798280D-05
ISDGMR: 89 0.1647040D-05 0.1647040D-05
ISDGMR: 90 0.1542317D-05 0.1542317D-05
ISDGMR: 91 0.1410535D-05 0.1410535D-05
ISDGMR: 92 0.1313321D-05 0.1313321D-05
ISDGMR: 93 0.1265667D-05 0.1265667D-05
ISDGMR: 94 0.1201773D-05 0.1201773D-05
ISDGMR: 95 0.1124606D-05 0.1124606D-05
ISDGMR: 96 0.1048977D-05 0.1048977D-05

```

ISDGMR: 97	0.9919448D-06	0.9919448D-06	ISDGMR: 170	0.1048358D-06	0.1048358D-06
ISDGMR: 98	0.9300402D-06	0.9300402D-06	ISDGMR: 171	0.1027944D-06	0.1027944D-06
ISDGMR: 99	0.8821723D-06	0.8821723D-06	ISDGMR: 172	0.1023771D-06	0.1023771D-06
ISDGMR: 100	0.8384653D-06	0.8384653D-06	ISDGMR: 173	0.1011014D-06	0.1011014D-06
ISDGMR: 101	0.7934727D-06	0.7934727D-06	ISDGMR: 174	0.9406789D-07	0.9406789D-07
ISDGMR: 102	0.7761850D-06	0.7761850D-06	ISDGMR: 175	0.8939042D-07	0.8939042D-07
ISDGMR: 103	0.7469685D-06	0.7469685D-06	ISDGMR: 176	0.8504957D-07	0.8504957D-07
ISDGMR: 104	0.7191231D-06	0.7191231D-06	ISDGMR: 177	0.8429326D-07	0.8429326D-07
ISDGMR: 105	0.6976310D-06	0.6976310D-06	ISDGMR: 178	0.8230570D-07	0.8230570D-07
ISDGMR: 106	0.6626877D-06	0.6626877D-06	ISDGMR: 179	0.8070055D-07	0.8070055D-07
ISDGMR: 107	0.6439482D-06	0.6439482D-06	ISDGMR: 180	0.7830254D-07	0.7830254D-07
ISDGMR: 108	0.6300885D-06	0.6300885D-06	ISDGMR: 181	0.7710000D-07	0.7710000D-07
ISDGMR: 109	0.6160033D-06	0.6160033D-06	ISDGMR: 182	0.7229764D-07	0.7229764D-07
ISDGMR: 110	0.6004650D-06	0.6004650D-06	ISDGMR: 183	0.6857332D-07	0.6857332D-07
ISDGMR: 111	0.5890542D-06	0.5890542D-06	ISDGMR: 184	0.6832445D-07	0.6832445D-07
ISDGMR: 112	0.5697809D-06	0.5697809D-06	ISDGMR: 185	0.6675954D-07	0.6675954D-07
ISDGMR: 113	0.5594874D-06	0.5594874D-06	ISDGMR: 186	0.6667178D-07	0.6667178D-07
ISDGMR: 114	0.5495050D-06	0.5495050D-06	ISDGMR: 187	0.6564887D-07	0.6564887D-07
ISDGMR: 115	0.5456862D-06	0.5456862D-06	ISDGMR: 188	0.6332604D-07	0.6332604D-07
ISDGMR: 116	0.5271095D-06	0.5271095D-06	ISDGMR: 189	0.6101157D-07	0.6101157D-07
ISDGMR: 117	0.5179443D-06	0.5179443D-06	ISDGMR: 190	0.5976103D-07	0.5976103D-07
ISDGMR: 118	0.5089962D-06	0.5089962D-06	ISDGMR: 191	0.5766840D-07	0.5766840D-07
ISDGMR: 119	0.5088895D-06	0.5088895D-06	ISDGMR: 192	0.5540587D-07	0.5540587D-07
ISDGMR: 120	0.4980622D-06	0.4980622D-06	ISDGMR: 193	0.5452651D-07	0.5452651D-07
ISDGMR: 121	0.4750409D-06	0.4750409D-06	ISDGMR: 194	0.5206772D-07	0.5206772D-07
ISDGMR: 122	0.4622739D-06	0.4622739D-06	ISDGMR: 195	0.4887983D-07	0.4887983D-07
ISDGMR: 123	0.4569061D-06	0.4569061D-06	ISDGMR: 196	0.4750799D-07	0.4750799D-07
ISDGMR: 124	0.4539053D-06	0.4539053D-06	ISDGMR: 197	0.4668485D-07	0.4668485D-07
ISDGMR: 125	0.4445034D-06	0.4445034D-06	ISDGMR: 198	0.4518376D-07	0.4518376D-07
ISDGMR: 126	0.4299262D-06	0.4299262D-06	ISDGMR: 199	0.4345337D-07	0.4345337D-07
ISDGMR: 127	0.4224520D-06	0.4224520D-06	ISDGMR: 200	0.4216678D-07	0.4216678D-07
ISDGMR: 128	0.4196116D-06	0.4196116D-06	ISDGMR: 201	0.4163146D-07	0.4163146D-07
ISDGMR: 129	0.4109393D-06	0.4109393D-06	ISDGMR: 202	0.4096045D-07	0.4096045D-07
ISDGMR: 130	0.3959292D-06	0.3959292D-06	ISDGMR: 203	0.4004018D-07	0.4004018D-07
ISDGMR: 131	0.3848960D-06	0.3848960D-06	ISDGMR: 204	0.3829236D-07	0.3829236D-07
ISDGMR: 132	0.3808461D-06	0.3808461D-06	ISDGMR: 205	0.3585449D-07	0.3585449D-07
ISDGMR: 133	0.3771146D-06	0.3771146D-06	ISDGMR: 206	0.3504522D-07	0.3504522D-07
ISDGMR: 134	0.3652675D-06	0.3652675D-06	ISDGMR: 207	0.3400826D-07	0.3400826D-07
ISDGMR: 135	0.3493179D-06	0.3493179D-06	ISDGMR: 208	0.3228722D-07	0.3228722D-07
ISDGMR: 136	0.3384209D-06	0.3384209D-06	ISDGMR: 209	0.3175579D-07	0.3175579D-07
ISDGMR: 137	0.3330375D-06	0.3330375D-06	ISDGMR: 210	0.3039137D-07	0.3039137D-07
ISDGMR: 138	0.3292100D-06	0.3292100D-06	ISDGMR: 211	0.2914298D-07	0.2914298D-07
ISDGMR: 139	0.3226544D-06	0.3226544D-06	ISDGMR: 212	0.2773759D-07	0.2773759D-07
ISDGMR: 140	0.3161505D-06	0.3161505D-06	ISDGMR: 213	0.2708039D-07	0.2708039D-07
ISDGMR: 141	0.3064763D-06	0.3064763D-06	ISDGMR: 214	0.2596232D-07	0.2596232D-07
ISDGMR: 142	0.2988678D-06	0.2988678D-06	ISDGMR: 215	0.2515280D-07	0.2515280D-07
ISDGMR: 143	0.2972377D-06	0.2972377D-06	ISDGMR: 216	0.2425771D-07	0.2425771D-07
ISDGMR: 144	0.2935193D-06	0.2935193D-06	ISDGMR: 217	0.2388190D-07	0.2388190D-07
ISDGMR: 145	0.2852387D-06	0.2852387D-06	ISDGMR: 218	0.2309960D-07	0.2309960D-07
ISDGMR: 146	0.2728098D-06	0.2728098D-06	ISDGMR: 219	0.2223506D-07	0.2223506D-07
ISDGMR: 147	0.2567113D-06	0.2567113D-06	ISDGMR: 220	0.2219099D-07	0.2219099D-07
ISDGMR: 148	0.2497438D-06	0.2497438D-06	ISDGMR: 221	0.2152285D-07	0.2152285D-07
ISDGMR: 149	0.2471995D-06	0.2471995D-06	ISDGMR: 222	0.2126756D-07	0.2126756D-07
ISDGMR: 150	0.2444223D-06	0.2444223D-06	ISDGMR: 223	0.2089649D-07	0.2089649D-07
ISDGMR: 151	0.2355516D-06	0.2355516D-06	ISDGMR: 224	0.2029187D-07	0.2029187D-07
ISDGMR: 152	0.2240044D-06	0.2240044D-06	ISDGMR: 225	0.2011749D-07	0.2011749D-07
ISDGMR: 153	0.2082762D-06	0.2082762D-06	ISDGMR: 226	0.1928582D-07	0.1928582D-07
ISDGMR: 154	0.1788146D-06	0.1788146D-06	ISDGMR: 227	0.1866472D-07	0.1866472D-07
ISDGMR: 155	0.1664573D-06	0.1664573D-06	ISDGMR: 228	0.1819002D-07	0.1819002D-07
ISDGMR: 156	0.1605278D-06	0.1605278D-06	ISDGMR: 229	0.1791516D-07	0.1791516D-07
ISDGMR: 157	0.1503153D-06	0.1503153D-06	ISDGMR: 230	0.1781379D-07	0.1781379D-07
ISDGMR: 158	0.1471468D-06	0.1471468D-06	ISDGMR: 231	0.1728468D-07	0.1728468D-07
ISDGMR: 159	0.1415537D-06	0.1415537D-06	ISDGMR: 232	0.1692334D-07	0.1692334D-07
ISDGMR: 160	0.1331969D-06	0.1331969D-06	ISDGMR: 233	0.1624317D-07	0.1624317D-07
ISDGMR: 161	0.1265107D-06	0.1265107D-06	ISDGMR: 234	0.1598918D-07	0.1598918D-07
ISDGMR: 162	0.1217590D-06	0.1217590D-06	ISDGMR: 235	0.1576481D-07	0.1576481D-07
ISDGMR: 163	0.1204564D-06	0.1204564D-06	ISDGMR: 236	0.1548514D-07	0.1548514D-07
ISDGMR: 164	0.1200309D-06	0.1200309D-06	ISDGMR: 237	0.1476130D-07	0.1476130D-07
ISDGMR: 165	0.1188571D-06	0.1188571D-06	ISDGMR: 238	0.1433754D-07	0.1433754D-07
ISDGMR: 166	0.1163256D-06	0.1163256D-06	ISDGMR: 239	0.1341154D-07	0.1341154D-07
ISDGMR: 167	0.1124010D-06	0.1124010D-06	ISDGMR: 240	0.1310562D-07	0.1310562D-07
ISDGMR: 168	0.1112317D-06	0.1112317D-06	ISDGMR: 241	0.1269598D-07	0.1269598D-07
ISDGMR: 169	0.1088022D-06	0.1088022D-06	ISDGMR: 242	0.1213756D-07	0.1213756D-07

```

ISDGMR: 243 0.1145815D-07 0.1145815D-07
ISDGMR: 244 0.1064574D-07 0.1064574D-07
ISDGMR: 245 0.1008699D-07 0.1008699D-07
ISDGMR: 246 0.9779904D-08 0.9779904D-08
ISDGMR: 247 0.9647356D-08 0.9647356D-08
ISDGMR: 248 0.9338416D-08 0.9338416D-08
ISDGMR: 249 0.8795011D-08 0.8795011D-08
ISDGMR: 250 0.8052598D-08 0.8052598D-08
ISDGMR: 251 0.7553170D-08 0.7553170D-08
ISDGMR: 252 0.7341054D-08 0.7341054D-08
ISDGMR: 253 0.7069986D-08 0.7069986D-08
ISDGMR: 254 0.6857205D-08 0.6857205D-08
ISDGMR: 255 0.6382739D-08 0.6382739D-08
ISDGMR: 256 0.6167803D-08 0.6167803D-08
ISDGMR: 257 0.5821296D-08 0.5821296D-08
ISDGMR: 258 0.5769581D-08 0.5769581D-08
ISDGMR: 259 0.5605953D-08 0.5605953D-08
ISDGMR: 260 0.5540977D-08 0.5540977D-08
ISDGMR: 261 0.5293554D-08 0.5293554D-08
ISDGMR: 262 0.4788984D-08 0.4788984D-08
ISDGMR: 263 0.4340443D-08 0.4340443D-08
ISDGMR: 264 0.4084848D-08 0.4084848D-08
ISDGMR: 265 0.3940993D-08 0.3940993D-08
ISDGMR: 266 0.3747512D-08 0.3747512D-08
ISDGMR: 267 0.3198645D-08 0.3198645D-08
ISDGMR: 268 0.2987456D-08 0.2987456D-08
ISDGMR: 269 0.2869571D-08 0.2869571D-08
ISDGMR: 270 0.2818236D-08 0.2818236D-08
ISDGMR: 271 0.2782289D-08 0.2782289D-08
ISDGMR: 272 0.2711505D-08 0.2711505D-08
ISDGMR: 273 0.2596458D-08 0.2596458D-08
ISDGMR: 274 0.2555999D-08 0.2555999D-08
ISDGMR: 275 0.2536786D-08 0.2536786D-08
ISDGMR: 276 0.2500417D-08 0.2500417D-08
ISDGMR: 277 0.2487501D-08 0.2487501D-08
ISDGMR: 278 0.2363446D-08 0.2363446D-08
ISDGMR: 279 0.2185984D-08 0.2185984D-08
ISDGMR: 280 0.2108136D-08 0.2108136D-08
ISDGMR: 281 0.2093850D-08 0.2093850D-08
ISDGMR: 282 0.2041038D-08 0.2041038D-08
ISDGMR: 283 0.2022680D-08 0.2022680D-08
ISDGMR: 284 0.1826140D-08 0.1826140D-08
ISDGMR: 285 0.1593830D-08 0.1593830D-08
ISDGMR: 286 0.1501515D-08 0.1501515D-08
ISDGMR: 287 0.1451095D-08 0.1451095D-08
ISDGMR: 288 0.1442624D-08 0.1442624D-08
ISDGMR: 289 0.1343641D-08 0.1343641D-08
ISDGMR: 290 0.1274283D-08 0.1274283D-08
ISDGMR: 291 0.1192860D-08 0.1192860D-08
ISDGMR: 292 0.1165288D-08 0.1165288D-08
ISDGMR: 293 0.1134957D-08 0.1134957D-08
ISDGMR: 294 0.1123562D-08 0.1123562D-08
ISDGMR: 295 0.1085848D-08 0.1085848D-08
ISDGMR: 296 0.1018819D-08 0.1018819D-08
ISDGMR: 297 0.9984792D-09 0.9984792D-09
ISDGMR: 298 0.9948420D-09 0.9948420D-09
ISDGMR: 299 0.9912255D-09 0.9912255D-09
ISDGMR: 300 0.9826184D-09 0.9826184D-09
ISDGMR: 301 0.9443024D-09 0.9443024D-09
ISDGMR: 302 0.9191136D-09 0.9191136D-09
ISDGMR: 303 0.9037485D-09 0.9037485D-09
ISDGMR: 304 0.8960644D-09 0.8960644D-09
ISDGMR: 305 0.7938420D-09 0.7938420D-09
ISDGMR: 306 0.5556563D-09 0.5556563D-09
ISDGMR: 307 0.5336980D-09 0.5336980D-09
ISDGMR: 308 0.5204510D-09 0.5204510D-09
ISDGMR: 309 0.4134542D-09 0.4134542D-09
ISDGMR: 310 0.3396408D-09 0.3396408D-09
ISDGMR: 311 0.3212430D-09 0.3212430D-09
ISDGMR: 312 0.3116521D-09 0.3116521D-09
ISDGMR: 313 0.3077811D-09 0.3077811D-09
ISDGMR: 314 0.3038863D-09 0.3038863D-09
ISDGMR: 315 0.2861447D-09 0.2861447D-09
ISDGMR: 316 0.2652889D-09 0.2652889D-09
ISDGMR: 317 0.2557861D-09 0.2557861D-09
ISDGMR: 318 0.2514835D-09 0.2514835D-09
ISDGMR: 319 0.2422017D-09 0.2422017D-09
ISDGMR: 320 0.2233997D-09 0.2233997D-09
ISDGMR: 321 0.2215909D-09 0.2215909D-09
ISDGMR: 322 0.2092183D-09 0.2092183D-09
ISDGMR: 323 0.1523821D-09 0.1523821D-09
ISDGMR: 324 0.1261705D-09 0.1261705D-09
ISDGMR: 325 0.1245678D-09 0.1245678D-09
ISDGMR: 326 0.1131624D-09 0.1131624D-09
ISDGMR: 327 0.7774514D-10 0.7774514D-10
IErr= 0 Err= 7.77D-11 NSaved= 6 NIter= 327 NITot= 334.
PS= 192.0000000000000 PSN= 192.0000000000000 RNE=
192.0000000000000 Err=-4.44D-16
ItDFit: ISolve= 4 NSAvIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=
1000 IStorA=2
Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.71D+03 BPNorm= 7.02D+01
Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10
Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=
744 KMP= 744
Iter Natral Err Est Error Estimate
ISDGMR: 0 0.5233486D-03 0.5233486D-03
ISDGMR: 1 0.3312510D-03 0.3312510D-03
ISDGMR: 2 0.1442591D-03 0.1442591D-03
ISDGMR: 3 0.8065875D-04 0.8065875D-04
ISDGMR: 4 0.5586363D-04 0.5586363D-04
ISDGMR: 5 0.3937047D-04 0.3937047D-04
ISDGMR: 6 0.3361850D-04 0.3361850D-04
ISDGMR: 7 0.3197028D-04 0.3197028D-04
ISDGMR: 8 0.2994465D-04 0.2994465D-04
ISDGMR: 9 0.2570491D-04 0.2570491D-04
ISDGMR: 10 0.2345638D-04 0.2345638D-04
ISDGMR: 11 0.1895220D-04 0.1895220D-04
ISDGMR: 12 0.1414211D-04 0.1414211D-04
ISDGMR: 13 0.1260182D-04 0.1260182D-04
ISDGMR: 14 0.1166156D-04 0.1166156D-04
ISDGMR: 15 0.1029355D-04 0.1029355D-04
ISDGMR: 16 0.8669908D-05 0.8669908D-05
ISDGMR: 17 0.6733452D-05 0.6733452D-05
ISDGMR: 18 0.5990512D-05 0.5990512D-05
ISDGMR: 19 0.5181612D-05 0.5181612D-05
ISDGMR: 20 0.4729977D-05 0.4729977D-05
ISDGMR: 21 0.4360260D-05 0.4360260D-05
ISDGMR: 22 0.4147550D-05 0.4147550D-05
ISDGMR: 23 0.3911137D-05 0.3911137D-05
ISDGMR: 24 0.3711973D-05 0.3711973D-05
ISDGMR: 25 0.3500776D-05 0.3500776D-05
ISDGMR: 26 0.3111801D-05 0.3111801D-05
ISDGMR: 27 0.2672756D-05 0.2672756D-05
ISDGMR: 28 0.2477885D-05 0.2477885D-05
ISDGMR: 29 0.2304784D-05 0.2304784D-05
ISDGMR: 30 0.2198263D-05 0.2198263D-05
ISDGMR: 31 0.2128006D-05 0.2128006D-05
ISDGMR: 32 0.2048031D-05 0.2048031D-05
ISDGMR: 33 0.2019047D-05 0.2019047D-05
ISDGMR: 34 0.1978215D-05 0.1978215D-05
ISDGMR: 35 0.1915028D-05 0.1915028D-05
ISDGMR: 36 0.1831434D-05 0.1831434D-05
ISDGMR: 37 0.1773166D-05 0.1773166D-05
ISDGMR: 38 0.1731239D-05 0.1731239D-05
ISDGMR: 39 0.1703817D-05 0.1703817D-05
ISDGMR: 40 0.1670030D-05 0.1670030D-05
ISDGMR: 41 0.1612387D-05 0.1612387D-05
ISDGMR: 42 0.1540523D-05 0.1540523D-05
ISDGMR: 43 0.1493491D-05 0.1493491D-05
ISDGMR: 44 0.1479263D-05 0.1479263D-05
ISDGMR: 45 0.1466020D-05 0.1466020D-05
ISDGMR: 46 0.1426521D-05 0.1426521D-05
ISDGMR: 47 0.1392609D-05 0.1392609D-05
ISDGMR: 48 0.1363522D-05 0.1363522D-05
ISDGMR: 49 0.1354996D-05 0.1354996D-05
ISDGMR: 50 0.1353607D-05 0.1353607D-05

```

ISDGMR:	51	0.1350198D-05	0.1350198D-05	ISDGMR:	124	0.1185487D-06	0.1185487D-06
ISDGMR:	52	0.1329773D-05	0.1329773D-05	ISDGMR:	125	0.1175628D-06	0.1175628D-06
ISDGMR:	53	0.1312602D-05	0.1312602D-05	ISDGMR:	126	0.1162772D-06	0.1162772D-06
ISDGMR:	54	0.1292721D-05	0.1292721D-05	ISDGMR:	127	0.1136640D-06	0.1136640D-06
ISDGMR:	55	0.1292483D-05	0.1292483D-05	ISDGMR:	128	0.1132468D-06	0.1132468D-06
ISDGMR:	56	0.1290756D-05	0.1290756D-05	ISDGMR:	129	0.1124537D-06	0.1124537D-06
ISDGMR:	57	0.1275685D-05	0.1275685D-05	ISDGMR:	130	0.1114245D-06	0.1114245D-06
ISDGMR:	58	0.1220570D-05	0.1220570D-05	ISDGMR:	131	0.1101927D-06	0.1101927D-06
ISDGMR:	59	0.1216517D-05	0.1216517D-05	ISDGMR:	132	0.1074451D-06	0.1074451D-06
ISDGMR:	60	0.1205036D-05	0.1205036D-05	ISDGMR:	133	0.1055415D-06	0.1055415D-06
ISDGMR:	61	0.1203156D-05	0.1203156D-05	ISDGMR:	134	0.1015701D-06	0.1015701D-06
ISDGMR:	62	0.1188104D-05	0.1188104D-05	ISDGMR:	135	0.9911012D-07	0.9911012D-07
ISDGMR:	63	0.1168528D-05	0.1168528D-05	ISDGMR:	136	0.9606523D-07	0.9606523D-07
ISDGMR:	64	0.1163548D-05	0.1163548D-05	ISDGMR:	137	0.9214876D-07	0.9214876D-07
ISDGMR:	65	0.1158618D-05	0.1158618D-05	ISDGMR:	138	0.9064890D-07	0.9064890D-07
ISDGMR:	66	0.1152176D-05	0.1152176D-05	ISDGMR:	139	0.8694069D-07	0.8694069D-07
ISDGMR:	67	0.1132092D-05	0.1132092D-05	ISDGMR:	140	0.8350055D-07	0.8350055D-07
ISDGMR:	68	0.1093440D-05	0.1093440D-05	ISDGMR:	141	0.8167031D-07	0.8167031D-07
ISDGMR:	69	0.1070452D-05	0.1070452D-05	ISDGMR:	142	0.7799082D-07	0.7799082D-07
ISDGMR:	70	0.1045800D-05	0.1045800D-05	ISDGMR:	143	0.7416017D-07	0.7416017D-07
ISDGMR:	71	0.9980934D-06	0.9980934D-06	ISDGMR:	144	0.7241298D-07	0.7241298D-07
ISDGMR:	72	0.9171932D-06	0.9171932D-06	ISDGMR:	145	0.7111814D-07	0.7111814D-07
ISDGMR:	73	0.8830513D-06	0.8830513D-06	ISDGMR:	146	0.6859097D-07	0.6859097D-07
ISDGMR:	74	0.8636075D-06	0.8636075D-06	ISDGMR:	147	0.6313742D-07	0.6313742D-07
ISDGMR:	75	0.8321395D-06	0.8321395D-06	ISDGMR:	148	0.5987990D-07	0.5987990D-07
ISDGMR:	76	0.8013290D-06	0.8013290D-06	ISDGMR:	149	0.5868315D-07	0.5868315D-07
ISDGMR:	77	0.7782072D-06	0.7782072D-06	ISDGMR:	150	0.5738370D-07	0.5738370D-07
ISDGMR:	78	0.7584104D-06	0.7584104D-06	ISDGMR:	151	0.5481952D-07	0.5481952D-07
ISDGMR:	79	0.7364985D-06	0.7364985D-06	ISDGMR:	152	0.5327071D-07	0.5327071D-07
ISDGMR:	80	0.6934672D-06	0.6934672D-06	ISDGMR:	153	0.5048181D-07	0.5048181D-07
ISDGMR:	81	0.6631762D-06	0.6631762D-06	ISDGMR:	154	0.4601894D-07	0.4601894D-07
ISDGMR:	82	0.6418022D-06	0.6418022D-06	ISDGMR:	155	0.4519234D-07	0.4519234D-07
ISDGMR:	83	0.5889111D-06	0.5889111D-06	ISDGMR:	156	0.4383784D-07	0.4383784D-07
ISDGMR:	84	0.5195785D-06	0.5195785D-06	ISDGMR:	157	0.4344832D-07	0.4344832D-07
ISDGMR:	85	0.5000461D-06	0.5000461D-06	ISDGMR:	158	0.4211962D-07	0.4211962D-07
ISDGMR:	86	0.4758495D-06	0.4758495D-06	ISDGMR:	159	0.4140497D-07	0.4140497D-07
ISDGMR:	87	0.4412053D-06	0.4412053D-06	ISDGMR:	160	0.4060699D-07	0.4060699D-07
ISDGMR:	88	0.4188388D-06	0.4188388D-06	ISDGMR:	161	0.3918916D-07	0.3918916D-07
ISDGMR:	89	0.4005267D-06	0.4005267D-06	ISDGMR:	162	0.3786749D-07	0.3786749D-07
ISDGMR:	90	0.3637338D-06	0.3637338D-06	ISDGMR:	163	0.3655449D-07	0.3655449D-07
ISDGMR:	91	0.3161401D-06	0.3161401D-06	ISDGMR:	164	0.3608833D-07	0.3608833D-07
ISDGMR:	92	0.3028444D-06	0.3028444D-06	ISDGMR:	165	0.3547708D-07	0.3547708D-07
ISDGMR:	93	0.2989348D-06	0.2989348D-06	ISDGMR:	166	0.3509769D-07	0.3509769D-07
ISDGMR:	94	0.2923775D-06	0.2923775D-06	ISDGMR:	167	0.3400696D-07	0.3400696D-07
ISDGMR:	95	0.2853164D-06	0.2853164D-06	ISDGMR:	168	0.3334430D-07	0.3334430D-07
ISDGMR:	96	0.2741228D-06	0.2741228D-06	ISDGMR:	169	0.3310901D-07	0.3310901D-07
ISDGMR:	97	0.2665266D-06	0.2665266D-06	ISDGMR:	170	0.3130131D-07	0.3130131D-07
ISDGMR:	98	0.2575737D-06	0.2575737D-06	ISDGMR:	171	0.2958614D-07	0.2958614D-07
ISDGMR:	99	0.2501628D-06	0.2501628D-06	ISDGMR:	172	0.2872857D-07	0.2872857D-07
ISDGMR:	100	0.2453370D-06	0.2453370D-06	ISDGMR:	173	0.2804248D-07	0.2804248D-07
ISDGMR:	101	0.2360423D-06	0.2360423D-06	ISDGMR:	174	0.2720495D-07	0.2720495D-07
ISDGMR:	102	0.2298856D-06	0.2298856D-06	ISDGMR:	175	0.2691459D-07	0.2691459D-07
ISDGMR:	103	0.2219663D-06	0.2219663D-06	ISDGMR:	176	0.2581905D-07	0.2581905D-07
ISDGMR:	104	0.2178373D-06	0.2178373D-06	ISDGMR:	177	0.2508084D-07	0.2508084D-07
ISDGMR:	105	0.2079054D-06	0.2079054D-06	ISDGMR:	178	0.2489958D-07	0.2489958D-07
ISDGMR:	106	0.1971042D-06	0.1971042D-06	ISDGMR:	179	0.2437350D-07	0.2437350D-07
ISDGMR:	107	0.1877977D-06	0.1877977D-06	ISDGMR:	180	0.2355960D-07	0.2355960D-07
ISDGMR:	108	0.1806446D-06	0.1806446D-06	ISDGMR:	181	0.2262686D-07	0.2262686D-07
ISDGMR:	109	0.1709314D-06	0.1709314D-06	ISDGMR:	182	0.2180365D-07	0.2180365D-07
ISDGMR:	110	0.1645360D-06	0.1645360D-06	ISDGMR:	183	0.1998997D-07	0.1998997D-07
ISDGMR:	111	0.1585725D-06	0.1585725D-06	ISDGMR:	184	0.1969488D-07	0.1969488D-07
ISDGMR:	112	0.1485623D-06	0.1485623D-06	ISDGMR:	185	0.1937096D-07	0.1937096D-07
ISDGMR:	113	0.1415225D-06	0.1415225D-06	ISDGMR:	186	0.1903072D-07	0.1903072D-07
ISDGMR:	114	0.1397957D-06	0.1397957D-06	ISDGMR:	187	0.1894529D-07	0.1894529D-07
ISDGMR:	115	0.1397656D-06	0.1397656D-06	ISDGMR:	188	0.1846490D-07	0.1846490D-07
ISDGMR:	116	0.1334721D-06	0.1334721D-06	ISDGMR:	189	0.1808188D-07	0.1808188D-07
ISDGMR:	117	0.1299607D-06	0.1299607D-06	ISDGMR:	190	0.1787529D-07	0.1787529D-07
ISDGMR:	118	0.1269357D-06	0.1269357D-06	ISDGMR:	191	0.1742251D-07	0.1742251D-07
ISDGMR:	119	0.1265634D-06	0.1265634D-06	ISDGMR:	192	0.1654815D-07	0.1654815D-07
ISDGMR:	120	0.1255213D-06	0.1255213D-06	ISDGMR:	193	0.1639415D-07	0.1639415D-07
ISDGMR:	121	0.1236328D-06	0.1236328D-06	ISDGMR:	194	0.1599436D-07	0.1599436D-07
ISDGMR:	122	0.1205498D-06	0.1205498D-06	ISDGMR:	195	0.1523386D-07	0.1523386D-07
ISDGMR:	123	0.1191417D-06	0.1191417D-06	ISDGMR:	196	0.1495041D-07	0.1495041D-07

ISDGMR: 197	0.1449358D-07	0.1449358D-07	ISDGMR: 270	0.9573350D-09	0.9573350D-09
ISDGMR: 198	0.1412546D-07	0.1412546D-07	ISDGMR: 271	0.9434116D-09	0.9434116D-09
ISDGMR: 199	0.1379510D-07	0.1379510D-07	ISDGMR: 272	0.9014399D-09	0.9014399D-09
ISDGMR: 200	0.1274405D-07	0.1274405D-07	ISDGMR: 273	0.8263189D-09	0.8263189D-09
ISDGMR: 201	0.1220918D-07	0.1220918D-07	ISDGMR: 274	0.7865014D-09	0.7865014D-09
ISDGMR: 202	0.1191738D-07	0.1191738D-07	ISDGMR: 275	0.7768076D-09	0.7768076D-09
ISDGMR: 203	0.1123257D-07	0.1123257D-07	ISDGMR: 276	0.7703267D-09	0.7703267D-09
ISDGMR: 204	0.1086916D-07	0.1086916D-07	ISDGMR: 277	0.7480596D-09	0.7480596D-09
ISDGMR: 205	0.1034336D-07	0.1034336D-07	ISDGMR: 278	0.7295696D-09	0.7295696D-09
ISDGMR: 206	0.9776092D-08	0.9776092D-08	ISDGMR: 279	0.6669298D-09	0.6669298D-09
ISDGMR: 207	0.9594442D-08	0.9594442D-08	ISDGMR: 280	0.6182499D-09	0.6182499D-09
ISDGMR: 208	0.9314695D-08	0.9314695D-08	ISDGMR: 281	0.6127325D-09	0.6127325D-09
ISDGMR: 209	0.9182026D-08	0.9182026D-08	ISDGMR: 282	0.6060651D-09	0.6060651D-09
ISDGMR: 210	0.9037581D-08	0.9037581D-08	ISDGMR: 283	0.6004981D-09	0.6004981D-09
ISDGMR: 211	0.8789456D-08	0.8789456D-08	ISDGMR: 284	0.5227865D-09	0.5227865D-09
ISDGMR: 212	0.8311241D-08	0.8311241D-08	ISDGMR: 285	0.4407215D-09	0.4407215D-09
ISDGMR: 213	0.8160141D-08	0.8160141D-08	ISDGMR: 286	0.4317995D-09	0.4317995D-09
ISDGMR: 214	0.7961841D-08	0.7961841D-08	ISDGMR: 287	0.4045731D-09	0.4045731D-09
ISDGMR: 215	0.7753334D-08	0.7753334D-08	ISDGMR: 288	0.3953787D-09	0.3953787D-09
ISDGMR: 216	0.7462863D-08	0.7462863D-08	ISDGMR: 289	0.3683462D-09	0.3683462D-09
ISDGMR: 217	0.7229042D-08	0.7229042D-08	ISDGMR: 290	0.3496755D-09	0.3496755D-09
ISDGMR: 218	0.7034761D-08	0.7034761D-08	ISDGMR: 291	0.3333696D-09	0.3333696D-09
ISDGMR: 219	0.6786265D-08	0.6786265D-08	ISDGMR: 292	0.3234233D-09	0.3234233D-09
ISDGMR: 220	0.6529004D-08	0.6529004D-08	ISDGMR: 293	0.3214563D-09	0.3214563D-09
ISDGMR: 221	0.6344097D-08	0.6344097D-08	ISDGMR: 294	0.3179612D-09	0.3179612D-09
ISDGMR: 222	0.6163413D-08	0.6163413D-08	ISDGMR: 295	0.3122737D-09	0.3122737D-09
ISDGMR: 223	0.6021503D-08	0.6021503D-08	ISDGMR: 296	0.2969759D-09	0.2969759D-09
ISDGMR: 224	0.5926985D-08	0.5926985D-08	ISDGMR: 297	0.2943042D-09	0.2943042D-09
ISDGMR: 225	0.5787295D-08	0.5787295D-08	ISDGMR: 298	0.2888873D-09	0.2888873D-09
ISDGMR: 226	0.5706533D-08	0.5706533D-08	ISDGMR: 299	0.2873164D-09	0.2873164D-09
ISDGMR: 227	0.5591722D-08	0.5591722D-08	ISDGMR: 300	0.2746563D-09	0.2746563D-09
ISDGMR: 228	0.5468319D-08	0.5468319D-08	ISDGMR: 301	0.2618609D-09	0.2618609D-09
ISDGMR: 229	0.5400727D-08	0.5400727D-08	ISDGMR: 302	0.2592417D-09	0.2592417D-09
ISDGMR: 230	0.5335397D-08	0.5335397D-08	ISDGMR: 303	0.2583155D-09	0.2583155D-09
ISDGMR: 231	0.5130031D-08	0.5130031D-08	ISDGMR: 304	0.2500232D-09	0.2500232D-09
ISDGMR: 232	0.4912036D-08	0.4912036D-08	ISDGMR: 305	0.2381642D-09	0.2381642D-09
ISDGMR: 233	0.4578431D-08	0.4578431D-08	ISDGMR: 306	0.1756748D-09	0.1756748D-09
ISDGMR: 234	0.4411245D-08	0.4411245D-08	ISDGMR: 307	0.1601100D-09	0.1601100D-09
ISDGMR: 235	0.4224802D-08	0.4224802D-08	ISDGMR: 308	0.1583985D-09	0.1583985D-09
ISDGMR: 236	0.4122534D-08	0.4122534D-08	ISDGMR: 309	0.1478190D-09	0.1478190D-09
ISDGMR: 237	0.3956331D-08	0.3956331D-08	ISDGMR: 310	0.1095729D-09	0.1095729D-09
ISDGMR: 238	0.3766194D-08	0.3766194D-08	ISDGMR: 311	0.1039548D-09	0.1039548D-09
ISDGMR: 239	0.3518224D-08	0.3518224D-08	ISDGMR: 312	0.9961877D-10	0.9961877D-10
ISDGMR: 240	0.3405790D-08	0.3405790D-08	IErr=	0 Err= 9.96D-11 NSaved= 6 NIter= 312 NITot= 319.	
ISDGMR: 241	0.3362069D-08	0.3362069D-08	PS=	192.000000000002 PSN= 192.000000000000 RNE=	
ISDGMR: 242	0.3300352D-08	0.3300352D-08		192.000000000000 Err= 1.48D-16	
ISDGMR: 243	0.3202777D-08	0.3202777D-08	ItDFit: ISolve= 4 NSavIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=		
ISDGMR: 244	0.3080358D-08	0.3080358D-08	1000 IStorA=2		
ISDGMR: 245	0.2982094D-08	0.2982094D-08	Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.72D+03 BPNorm= 7.03D+01		
ISDGMR: 246	0.2895337D-08	0.2895337D-08	Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10		
ISDGMR: 247	0.2853500D-08	0.2853500D-08	Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=		
ISDGMR: 248	0.2801906D-08	0.2801906D-08	744 KMP= 744		
ISDGMR: 249	0.2647141D-08	0.2647141D-08	Iter Natral Er Est Error Estimate		
ISDGMR: 250	0.2369395D-08	0.2369395D-08	ISDGMR: 0	0.1097230D-03	0.1097230D-03
ISDGMR: 251	0.2163429D-08	0.2163429D-08	ISDGMR: 1	0.8552729D-04	0.8552729D-04
ISDGMR: 252	0.1976574D-08	0.1976574D-08	ISDGMR: 2	0.2774921D-04	0.2774921D-04
ISDGMR: 253	0.1946586D-08	0.1946586D-08	ISDGMR: 3	0.1823182D-04	0.1823182D-04
ISDGMR: 254	0.1883776D-08	0.1883776D-08	ISDGMR: 4	0.1534097D-04	0.1534097D-04
ISDGMR: 255	0.1792636D-08	0.1792636D-08	ISDGMR: 5	0.1366303D-04	0.1366303D-04
ISDGMR: 256	0.1682794D-08	0.1682794D-08	ISDGMR: 6	0.1331147D-04	0.1331147D-04
ISDGMR: 257	0.1578516D-08	0.1578516D-08	ISDGMR: 7	0.1306311D-04	0.1306311D-04
ISDGMR: 258	0.1485916D-08	0.1485916D-08	ISDGMR: 8	0.1177709D-04	0.1177709D-04
ISDGMR: 259	0.1478413D-08	0.1478413D-08	ISDGMR: 9	0.1046511D-04	0.1046511D-04
ISDGMR: 260	0.1448042D-08	0.1448042D-08	ISDGMR: 10	0.9372464D-05	0.9372464D-05
ISDGMR: 261	0.1430432D-08	0.1430432D-08	ISDGMR: 11	0.6992339D-05	0.6992339D-05
ISDGMR: 262	0.1279719D-08	0.1279719D-08	ISDGMR: 12	0.5844314D-05	0.5844314D-05
ISDGMR: 263	0.1172431D-08	0.1172431D-08	ISDGMR: 13	0.4523572D-05	0.4523572D-05
ISDGMR: 264	0.1154423D-08	0.1154423D-08	ISDGMR: 14	0.3977320D-05	0.3977320D-05
ISDGMR: 265	0.1133488D-08	0.1133488D-08	ISDGMR: 15	0.3530054D-05	0.3530054D-05
ISDGMR: 266	0.1121008D-08	0.1121008D-08	ISDGMR: 16	0.3203726D-05	0.3203726D-05
ISDGMR: 267	0.1047983D-08	0.1047983D-08	ISDGMR: 17	0.2930765D-05	0.2930765D-05
ISDGMR: 268	0.1022843D-08	0.1022843D-08	ISDGMR: 18	0.2604231D-05	0.2604231D-05
ISDGMR: 269	0.9870658D-09	0.9870658D-09	ISDGMR: 19	0.2280500D-05	0.2280500D-05

ISDGMR:	20	0.2159762D-05	0.2159762D-05	ISDGMR:	93	0.8836437D-07	0.8836437D-07
ISDGMR:	21	0.2000610D-05	0.2000610D-05	ISDGMR:	94	0.8661943D-07	0.8661943D-07
ISDGMR:	22	0.1854343D-05	0.1854343D-05	ISDGMR:	95	0.8284633D-07	0.8284633D-07
ISDGMR:	23	0.1569589D-05	0.1569589D-05	ISDGMR:	96	0.7963574D-07	0.7963574D-07
ISDGMR:	24	0.1288127D-05	0.1288127D-05	ISDGMR:	97	0.7817434D-07	0.7817434D-07
ISDGMR:	25	0.1167421D-05	0.1167421D-05	ISDGMR:	98	0.7708739D-07	0.7708739D-07
ISDGMR:	26	0.1077907D-05	0.1077907D-05	ISDGMR:	99	0.7524347D-07	0.7524347D-07
ISDGMR:	27	0.1009181D-05	0.1009181D-05	ISDGMR:	100	0.7332323D-07	0.7332323D-07
ISDGMR:	28	0.9057478D-06	0.9057478D-06	ISDGMR:	101	0.6989350D-07	0.6989350D-07
ISDGMR:	29	0.8392235D-06	0.8392235D-06	ISDGMR:	102	0.6612285D-07	0.6612285D-07
ISDGMR:	30	0.8053700D-06	0.8053700D-06	ISDGMR:	103	0.6186198D-07	0.6186198D-07
ISDGMR:	31	0.7807922D-06	0.7807922D-06	ISDGMR:	104	0.5922510D-07	0.5922510D-07
ISDGMR:	32	0.7677159D-06	0.7677159D-06	ISDGMR:	105	0.5625411D-07	0.5625411D-07
ISDGMR:	33	0.7405868D-06	0.7405868D-06	ISDGMR:	106	0.5241974D-07	0.5241974D-07
ISDGMR:	34	0.7065449D-06	0.7065449D-06	ISDGMR:	107	0.4871289D-07	0.4871289D-07
ISDGMR:	35	0.6413924D-06	0.6413924D-06	ISDGMR:	108	0.4830388D-07	0.4830388D-07
ISDGMR:	36	0.6074020D-06	0.6074020D-06	ISDGMR:	109	0.4490114D-07	0.4490114D-07
ISDGMR:	37	0.5999369D-06	0.5999369D-06	ISDGMR:	110	0.4353770D-07	0.4353770D-07
ISDGMR:	38	0.5827840D-06	0.5827840D-06	ISDGMR:	111	0.4323912D-07	0.4323912D-07
ISDGMR:	39	0.5617303D-06	0.5617303D-06	ISDGMR:	112	0.4166894D-07	0.4166894D-07
ISDGMR:	40	0.5268548D-06	0.5268548D-06	ISDGMR:	113	0.3918838D-07	0.3918838D-07
ISDGMR:	41	0.4799073D-06	0.4799073D-06	ISDGMR:	114	0.3809969D-07	0.3809969D-07
ISDGMR:	42	0.4363301D-06	0.4363301D-06	ISDGMR:	115	0.3740576D-07	0.3740576D-07
ISDGMR:	43	0.4174890D-06	0.4174890D-06	ISDGMR:	116	0.3573503D-07	0.3573503D-07
ISDGMR:	44	0.4031722D-06	0.4031722D-06	ISDGMR:	117	0.3482169D-07	0.3482169D-07
ISDGMR:	45	0.3845025D-06	0.3845025D-06	ISDGMR:	118	0.3358237D-07	0.3358237D-07
ISDGMR:	46	0.3565510D-06	0.3565510D-06	ISDGMR:	119	0.3218020D-07	0.3218020D-07
ISDGMR:	47	0.3418906D-06	0.3418906D-06	ISDGMR:	120	0.3099381D-07	0.3099381D-07
ISDGMR:	48	0.3293880D-06	0.3293880D-06	ISDGMR:	121	0.2964222D-07	0.2964222D-07
ISDGMR:	49	0.3166660D-06	0.3166660D-06	ISDGMR:	122	0.2864836D-07	0.2864836D-07
ISDGMR:	50	0.3062092D-06	0.3062092D-06	ISDGMR:	123	0.2771101D-07	0.2771101D-07
ISDGMR:	51	0.2892276D-06	0.2892276D-06	ISDGMR:	124	0.2673373D-07	0.2673373D-07
ISDGMR:	52	0.2727377D-06	0.2727377D-06	ISDGMR:	125	0.2600125D-07	0.2600125D-07
ISDGMR:	53	0.2649294D-06	0.2649294D-06	ISDGMR:	126	0.2449990D-07	0.2449990D-07
ISDGMR:	54	0.2626680D-06	0.2626680D-06	ISDGMR:	127	0.2356494D-07	0.2356494D-07
ISDGMR:	55	0.2548629D-06	0.2548629D-06	ISDGMR:	128	0.2297402D-07	0.2297402D-07
ISDGMR:	56	0.2353038D-06	0.2353038D-06	ISDGMR:	129	0.2274221D-07	0.2274221D-07
ISDGMR:	57	0.2226238D-06	0.2226238D-06	ISDGMR:	130	0.2156069D-07	0.2156069D-07
ISDGMR:	58	0.2144397D-06	0.2144397D-06	ISDGMR:	131	0.2134507D-07	0.2134507D-07
ISDGMR:	59	0.2071506D-06	0.2071506D-06	ISDGMR:	132	0.2112359D-07	0.2112359D-07
ISDGMR:	60	0.2038816D-06	0.2038816D-06	ISDGMR:	133	0.2074583D-07	0.2074583D-07
ISDGMR:	61	0.1992696D-06	0.1992696D-06	ISDGMR:	134	0.2046375D-07	0.2046375D-07
ISDGMR:	62	0.1967113D-06	0.1967113D-06	ISDGMR:	135	0.1998407D-07	0.1998407D-07
ISDGMR:	63	0.1915355D-06	0.1915355D-06	ISDGMR:	136	0.1914767D-07	0.1914767D-07
ISDGMR:	64	0.1857369D-06	0.1857369D-06	ISDGMR:	137	0.1904804D-07	0.1904804D-07
ISDGMR:	65	0.1843336D-06	0.1843336D-06	ISDGMR:	138	0.1853607D-07	0.1853607D-07
ISDGMR:	66	0.1822312D-06	0.1822312D-06	ISDGMR:	139	0.1810658D-07	0.1810658D-07
ISDGMR:	67	0.1779418D-06	0.1779418D-06	ISDGMR:	140	0.1786343D-07	0.1786343D-07
ISDGMR:	68	0.1740013D-06	0.1740013D-06	ISDGMR:	141	0.1745786D-07	0.1745786D-07
ISDGMR:	69	0.1717557D-06	0.1717557D-06	ISDGMR:	142	0.1708456D-07	0.1708456D-07
ISDGMR:	70	0.1683331D-06	0.1683331D-06	ISDGMR:	143	0.1677841D-07	0.1677841D-07
ISDGMR:	71	0.1632170D-06	0.1632170D-06	ISDGMR:	144	0.1580601D-07	0.1580601D-07
ISDGMR:	72	0.1599564D-06	0.1599564D-06	ISDGMR:	145	0.1384346D-07	0.1384346D-07
ISDGMR:	73	0.1594397D-06	0.1594397D-06	ISDGMR:	146	0.1291115D-07	0.1291115D-07
ISDGMR:	74	0.1552332D-06	0.1552332D-06	ISDGMR:	147	0.1256686D-07	0.1256686D-07
ISDGMR:	75	0.1500228D-06	0.1500228D-06	ISDGMR:	148	0.1201020D-07	0.1201020D-07
ISDGMR:	76	0.1488549D-06	0.1488549D-06	ISDGMR:	149	0.1190779D-07	0.1190779D-07
ISDGMR:	77	0.1469212D-06	0.1469212D-06	ISDGMR:	150	0.1152845D-07	0.1152845D-07
ISDGMR:	78	0.1436704D-06	0.1436704D-06	ISDGMR:	151	0.1107858D-07	0.1107858D-07
ISDGMR:	79	0.1418523D-06	0.1418523D-06	ISDGMR:	152	0.1059849D-07	0.1059849D-07
ISDGMR:	80	0.1403135D-06	0.1403135D-06	ISDGMR:	153	0.1034210D-07	0.1034210D-07
ISDGMR:	81	0.1396645D-06	0.1396645D-06	ISDGMR:	154	0.1004383D-07	0.1004383D-07
ISDGMR:	82	0.1386292D-06	0.1386292D-06	ISDGMR:	155	0.9644533D-08	0.9644533D-08
ISDGMR:	83	0.1336413D-06	0.1336413D-06	ISDGMR:	156	0.9539025D-08	0.9539025D-08
ISDGMR:	84	0.1285052D-06	0.1285052D-06	ISDGMR:	157	0.9350363D-08	0.9350363D-08
ISDGMR:	85	0.1266340D-06	0.1266340D-06	ISDGMR:	158	0.8844762D-08	0.8844762D-08
ISDGMR:	86	0.1204049D-06	0.1204049D-06	ISDGMR:	159	0.8687774D-08	0.8687774D-08
ISDGMR:	87	0.1155760D-06	0.1155760D-06	ISDGMR:	160	0.8558407D-08	0.8558407D-08
ISDGMR:	88	0.1084511D-06	0.1084511D-06	ISDGMR:	161	0.8236829D-08	0.8236829D-08
ISDGMR:	89	0.1023742D-06	0.1023742D-06	ISDGMR:	162	0.8019363D-08	0.8019363D-08
ISDGMR:	90	0.9529538D-07	0.9529538D-07	ISDGMR:	163	0.7581679D-08	0.7581679D-08
ISDGMR:	91	0.9201582D-07	0.9201582D-07	ISDGMR:	164	0.7424873D-08	0.7424873D-08
ISDGMR:	92	0.9033115D-07	0.9033115D-07	ISDGMR:	165	0.7366259D-08	0.7366259D-08

ISDGMR: 166	0.6976224D-08	0.6976224D-08	ISDGMR: 239	0.5567767D-09	0.5567767D-09
ISDGMR: 167	0.6618046D-08	0.6618046D-08	ISDGMR: 240	0.5482033D-09	0.5482033D-09
ISDGMR: 168	0.6385558D-08	0.6385558D-08	ISDGMR: 241	0.5378282D-09	0.5378282D-09
ISDGMR: 169	0.6069123D-08	0.6069123D-08	ISDGMR: 242	0.5190958D-09	0.5190958D-09
ISDGMR: 170	0.5919678D-08	0.5919678D-08	ISDGMR: 243	0.5073652D-09	0.5073652D-09
ISDGMR: 171	0.5818418D-08	0.5818418D-08	ISDGMR: 244	0.4799876D-09	0.4799876D-09
ISDGMR: 172	0.5714547D-08	0.5714547D-08	ISDGMR: 245	0.4698920D-09	0.4698920D-09
ISDGMR: 173	0.5258388D-08	0.5258388D-08	ISDGMR: 246	0.4639566D-09	0.4639566D-09
ISDGMR: 174	0.4850482D-08	0.4850482D-08	ISDGMR: 247	0.4607758D-09	0.4607758D-09
ISDGMR: 175	0.4486918D-08	0.4486918D-08	ISDGMR: 248	0.4559941D-09	0.4559941D-09
ISDGMR: 176	0.4261904D-08	0.4261904D-08	ISDGMR: 249	0.4355390D-09	0.4355390D-09
ISDGMR: 177	0.4235599D-08	0.4235599D-08	ISDGMR: 250	0.4005330D-09	0.4005330D-09
ISDGMR: 178	0.4174182D-08	0.4174182D-08	ISDGMR: 251	0.3870750D-09	0.3870750D-09
ISDGMR: 179	0.3975143D-08	0.3975143D-08	ISDGMR: 252	0.3797644D-09	0.3797644D-09
ISDGMR: 180	0.3677713D-08	0.3677713D-08	ISDGMR: 253	0.3732396D-09	0.3732396D-09
ISDGMR: 181	0.3581252D-08	0.3581252D-08	ISDGMR: 254	0.3640807D-09	0.3640807D-09
ISDGMR: 182	0.3375610D-08	0.3375610D-08	ISDGMR: 255	0.3473561D-09	0.3473561D-09
ISDGMR: 183	0.3241333D-08	0.3241333D-08	ISDGMR: 256	0.3415574D-09	0.3415574D-09
ISDGMR: 184	0.3215267D-08	0.3215267D-08	ISDGMR: 257	0.3307898D-09	0.3307898D-09
ISDGMR: 185	0.3173869D-08	0.3173869D-08	ISDGMR: 258	0.3235533D-09	0.3235533D-09
ISDGMR: 186	0.3100497D-08	0.3100497D-08	ISDGMR: 259	0.2987409D-09	0.2987409D-09
ISDGMR: 187	0.3095782D-08	0.3095782D-08	ISDGMR: 260	0.2857429D-09	0.2857429D-09
ISDGMR: 188	0.2978040D-08	0.2978040D-08	ISDGMR: 261	0.2686471D-09	0.2686471D-09
ISDGMR: 189	0.2924587D-08	0.2924587D-08	ISDGMR: 262	0.2577424D-09	0.2577424D-09
ISDGMR: 190	0.2860623D-08	0.2860623D-08	ISDGMR: 263	0.2507603D-09	0.2507603D-09
ISDGMR: 191	0.2857820D-08	0.2857820D-08	ISDGMR: 264	0.2439116D-09	0.2439116D-09
ISDGMR: 192	0.2770531D-08	0.2770531D-08	ISDGMR: 265	0.2320041D-09	0.2320041D-09
ISDGMR: 193	0.2761499D-08	0.2761499D-08	ISDGMR: 266	0.2162504D-09	0.2162504D-09
ISDGMR: 194	0.2702969D-08	0.2702969D-08	ISDGMR: 267	0.2090368D-09	0.2090368D-09
ISDGMR: 195	0.2630252D-08	0.2630252D-08	ISDGMR: 268	0.2065226D-09	0.2065226D-09
ISDGMR: 196	0.2573414D-08	0.2573414D-08	ISDGMR: 269	0.2019817D-09	0.2019817D-09
ISDGMR: 197	0.2522476D-08	0.2522476D-08	ISDGMR: 270	0.1983767D-09	0.1983767D-09
ISDGMR: 198	0.2485034D-08	0.2485034D-08	ISDGMR: 271	0.1916005D-09	0.1916005D-09
ISDGMR: 199	0.2467938D-08	0.2467938D-08	ISDGMR: 272	0.1877127D-09	0.1877127D-09
ISDGMR: 200	0.2430334D-08	0.2430334D-08	ISDGMR: 273	0.1805475D-09	0.1805475D-09
ISDGMR: 201	0.2379951D-08	0.2379951D-08	ISDGMR: 274	0.1756146D-09	0.1756146D-09
ISDGMR: 202	0.2317498D-08	0.2317498D-08	ISDGMR: 275	0.1722532D-09	0.1722532D-09
ISDGMR: 203	0.2294367D-08	0.2294367D-08	ISDGMR: 276	0.1722452D-09	0.1722452D-09
ISDGMR: 204	0.2231500D-08	0.2231500D-08	ISDGMR: 277	0.1677035D-09	0.1677035D-09
ISDGMR: 205	0.2017402D-08	0.2017402D-08	ISDGMR: 278	0.1566662D-09	0.1566662D-09
ISDGMR: 206	0.1965466D-08	0.1965466D-08	ISDGMR: 279	0.1510599D-09	0.1510599D-09
ISDGMR: 207	0.1865332D-08	0.1865332D-08	ISDGMR: 280	0.1494006D-09	0.1494006D-09
ISDGMR: 208	0.1839541D-08	0.1839541D-08	ISDGMR: 281	0.1479814D-09	0.1479814D-09
ISDGMR: 209	0.1820493D-08	0.1820493D-08	ISDGMR: 282	0.1453590D-09	0.1453590D-09
ISDGMR: 210	0.1683375D-08	0.1683375D-08	ISDGMR: 283	0.1372508D-09	0.1372508D-09
ISDGMR: 211	0.1627861D-08	0.1627861D-08	ISDGMR: 284	0.1252030D-09	0.1252030D-09
ISDGMR: 212	0.1571906D-08	0.1571906D-08	ISDGMR: 285	0.1171571D-09	0.1171571D-09
ISDGMR: 213	0.1512738D-08	0.1512738D-08	ISDGMR: 286	0.1142730D-09	0.1142730D-09
ISDGMR: 214	0.1475685D-08	0.1475685D-08	ISDGMR: 287	0.1087412D-09	0.1087412D-09
ISDGMR: 215	0.1390366D-08	0.1390366D-08	ISDGMR: 288	0.1040010D-09	0.1040010D-09
ISDGMR: 216	0.1357575D-08	0.1357575D-08	ISDGMR: 289	0.9115010D-10	0.9115010D-10
ISDGMR: 217	0.1304324D-08	0.1304324D-08	IErr= 0 Err= 9.12D-11 NSaved= 6 NIter= 289 NITot= 296.		
ISDGMR: 218	0.1283028D-08	0.1283028D-08	PS= 192.000000000002 PSN= 192.000000000000 RNE=		
ISDGMR: 219	0.1258460D-08	0.1258460D-08	192.000000000000 Err= 4.44D-16		
ISDGMR: 220	0.1175245D-08	0.1175245D-08	ItDFit: ISolve= 4 NSAvIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=		
ISDGMR: 221	0.1149898D-08	0.1149898D-08	1000 IStorA=2		
ISDGMR: 222	0.1107759D-08	0.1107759D-08	Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.72D+03 BPNorm= 7.03D+01		
ISDGMR: 223	0.1088200D-08	0.1088200D-08	Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10		
ISDGMR: 224	0.1016983D-08	0.1016983D-08	Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=		
ISDGMR: 225	0.9742248D-09	0.9742248D-09	744 KMP= 744		
ISDGMR: 226	0.9245156D-09	0.9245156D-09	Iter Natral Err Est Error Estimate		
ISDGMR: 227	0.8987622D-09	0.8987622D-09	ISDGMR: 0 0.6223216D-04 0.6223216D-04		
ISDGMR: 228	0.8830323D-09	0.8830323D-09	ISDGMR: 1 0.3379237D-04 0.3379237D-04		
ISDGMR: 229	0.8333619D-09	0.8333619D-09	ISDGMR: 2 0.1551669D-04 0.1551669D-04		
ISDGMR: 230	0.8237599D-09	0.8237599D-09	ISDGMR: 3 0.1051131D-04 0.1051131D-04		
ISDGMR: 231	0.7610117D-09	0.7610117D-09	ISDGMR: 4 0.7141645D-05 0.7141645D-05		
ISDGMR: 232	0.7340434D-09	0.7340434D-09	ISDGMR: 5 0.6403554D-05 0.6403554D-05		
ISDGMR: 233	0.6790897D-09	0.6790897D-09	ISDGMR: 6 0.6174138D-05 0.6174138D-05		
ISDGMR: 234	0.6589786D-09	0.6589786D-09	ISDGMR: 7 0.6077525D-05 0.6077525D-05		
ISDGMR: 235	0.6571912D-09	0.6571912D-09	ISDGMR: 8 0.5911672D-05 0.5911672D-05		
ISDGMR: 236	0.6233274D-09	0.6233274D-09	ISDGMR: 9 0.4837262D-05 0.4837262D-05		
ISDGMR: 237	0.6020633D-09	0.6020633D-09	ISDGMR: 10 0.4284337D-05 0.4284337D-05		
ISDGMR: 238	0.5690806D-09	0.5690806D-09	ISDGMR: 11 0.2900053D-05 0.2900053D-05		

ISDGMR:	12	0.2240034D-05	0.2240034D-05	ISDGMR:	85	0.5974133D-07	0.5974133D-07
ISDGMR:	13	0.1677797D-05	0.1677797D-05	ISDGMR:	86	0.5713381D-07	0.5713381D-07
ISDGMR:	14	0.1440186D-05	0.1440186D-05	ISDGMR:	87	0.5483494D-07	0.5483494D-07
ISDGMR:	15	0.1255916D-05	0.1255916D-05	ISDGMR:	88	0.5282442D-07	0.5282442D-07
ISDGMR:	16	0.1157176D-05	0.1157176D-05	ISDGMR:	89	0.5089115D-07	0.5089115D-07
ISDGMR:	17	0.1106244D-05	0.1106244D-05	ISDGMR:	90	0.4749181D-07	0.4749181D-07
ISDGMR:	18	0.1062070D-05	0.1062070D-05	ISDGMR:	91	0.4254983D-07	0.4254983D-07
ISDGMR:	19	0.9581797D-06	0.9581797D-06	ISDGMR:	92	0.4114269D-07	0.4114269D-07
ISDGMR:	20	0.8862501D-06	0.8862501D-06	ISDGMR:	93	0.4089399D-07	0.4089399D-07
ISDGMR:	21	0.7793220D-06	0.7793220D-06	ISDGMR:	94	0.3948868D-07	0.3948868D-07
ISDGMR:	22	0.7032372D-06	0.7032372D-06	ISDGMR:	95	0.3764732D-07	0.3764732D-07
ISDGMR:	23	0.5955344D-06	0.5955344D-06	ISDGMR:	96	0.3634059D-07	0.3634059D-07
ISDGMR:	24	0.5259514D-06	0.5259514D-06	ISDGMR:	97	0.3522402D-07	0.3522402D-07
ISDGMR:	25	0.4942002D-06	0.4942002D-06	ISDGMR:	98	0.3373835D-07	0.3373835D-07
ISDGMR:	26	0.4596382D-06	0.4596382D-06	ISDGMR:	99	0.3264659D-07	0.3264659D-07
ISDGMR:	27	0.4385922D-06	0.4385922D-06	ISDGMR:	100	0.3151679D-07	0.3151679D-07
ISDGMR:	28	0.4272724D-06	0.4272724D-06	ISDGMR:	101	0.3025295D-07	0.3025295D-07
ISDGMR:	29	0.4047956D-06	0.4047956D-06	ISDGMR:	102	0.2923224D-07	0.2923224D-07
ISDGMR:	30	0.3847398D-06	0.3847398D-06	ISDGMR:	103	0.2900208D-07	0.2900208D-07
ISDGMR:	31	0.3722505D-06	0.3722505D-06	ISDGMR:	104	0.2844269D-07	0.2844269D-07
ISDGMR:	32	0.3585360D-06	0.3585360D-06	ISDGMR:	105	0.2694515D-07	0.2694515D-07
ISDGMR:	33	0.3489120D-06	0.3489120D-06	ISDGMR:	106	0.2613982D-07	0.2613982D-07
ISDGMR:	34	0.3354824D-06	0.3354824D-06	ISDGMR:	107	0.2596827D-07	0.2596827D-07
ISDGMR:	35	0.3106236D-06	0.3106236D-06	ISDGMR:	108	0.2485624D-07	0.2485624D-07
ISDGMR:	36	0.2963068D-06	0.2963068D-06	ISDGMR:	109	0.2372870D-07	0.2372870D-07
ISDGMR:	37	0.2886036D-06	0.2886036D-06	ISDGMR:	110	0.2330644D-07	0.2330644D-07
ISDGMR:	38	0.2810075D-06	0.2810075D-06	ISDGMR:	111	0.2273220D-07	0.2273220D-07
ISDGMR:	39	0.2741552D-06	0.2741552D-06	ISDGMR:	112	0.2172505D-07	0.2172505D-07
ISDGMR:	40	0.2606372D-06	0.2606372D-06	ISDGMR:	113	0.2130731D-07	0.2130731D-07
ISDGMR:	41	0.2413741D-06	0.2413741D-06	ISDGMR:	114	0.2086936D-07	0.2086936D-07
ISDGMR:	42	0.2250476D-06	0.2250476D-06	ISDGMR:	115	0.1987091D-07	0.1987091D-07
ISDGMR:	43	0.2146805D-06	0.2146805D-06	ISDGMR:	116	0.1888878D-07	0.1888878D-07
ISDGMR:	44	0.2012356D-06	0.2012356D-06	ISDGMR:	117	0.1834458D-07	0.1834458D-07
ISDGMR:	45	0.1900082D-06	0.1900082D-06	ISDGMR:	118	0.1805613D-07	0.1805613D-07
ISDGMR:	46	0.1784961D-06	0.1784961D-06	ISDGMR:	119	0.1754202D-07	0.1754202D-07
ISDGMR:	47	0.1713316D-06	0.1713316D-06	ISDGMR:	120	0.1662019D-07	0.1662019D-07
ISDGMR:	48	0.1612597D-06	0.1612597D-06	ISDGMR:	121	0.1546136D-07	0.1546136D-07
ISDGMR:	49	0.1530431D-06	0.1530431D-06	ISDGMR:	122	0.1417220D-07	0.1417220D-07
ISDGMR:	50	0.1463983D-06	0.1463983D-06	ISDGMR:	123	0.1335594D-07	0.1335594D-07
ISDGMR:	51	0.1391255D-06	0.1391255D-06	ISDGMR:	124	0.1311993D-07	0.1311993D-07
ISDGMR:	52	0.1318536D-06	0.1318536D-06	ISDGMR:	125	0.1273586D-07	0.1273586D-07
ISDGMR:	53	0.1243709D-06	0.1243709D-06	ISDGMR:	126	0.1188732D-07	0.1188732D-07
ISDGMR:	54	0.1215553D-06	0.1215553D-06	ISDGMR:	127	0.1126415D-07	0.1126415D-07
ISDGMR:	55	0.1190128D-06	0.1190128D-06	ISDGMR:	128	0.1116578D-07	0.1116578D-07
ISDGMR:	56	0.1143856D-06	0.1143856D-06	ISDGMR:	129	0.1040301D-07	0.1040301D-07
ISDGMR:	57	0.1093021D-06	0.1093021D-06	ISDGMR:	130	0.9906497D-08	0.9906497D-08
ISDGMR:	58	0.1074814D-06	0.1074814D-06	ISDGMR:	131	0.9426889D-08	0.9426889D-08
ISDGMR:	59	0.1055885D-06	0.1055885D-06	ISDGMR:	132	0.9302447D-08	0.9302447D-08
ISDGMR:	60	0.1014847D-06	0.1014847D-06	ISDGMR:	133	0.9036007D-08	0.9036007D-08
ISDGMR:	61	0.9930514D-07	0.9930514D-07	ISDGMR:	134	0.8595802D-08	0.8595802D-08
ISDGMR:	62	0.9726835D-07	0.9726835D-07	ISDGMR:	135	0.8358821D-08	0.8358821D-08
ISDGMR:	63	0.9537062D-07	0.9537062D-07	ISDGMR:	136	0.8141290D-08	0.8141290D-08
ISDGMR:	64	0.9388064D-07	0.9388064D-07	ISDGMR:	137	0.7961000D-08	0.7961000D-08
ISDGMR:	65	0.9254136D-07	0.9254136D-07	ISDGMR:	138	0.7915952D-08	0.7915952D-08
ISDGMR:	66	0.9177470D-07	0.9177470D-07	ISDGMR:	139	0.7820616D-08	0.7820616D-08
ISDGMR:	67	0.8987016D-07	0.8987016D-07	ISDGMR:	140	0.7573597D-08	0.7573597D-08
ISDGMR:	68	0.8792519D-07	0.8792519D-07	ISDGMR:	141	0.7402206D-08	0.7402206D-08
ISDGMR:	69	0.8758501D-07	0.8758501D-07	ISDGMR:	142	0.7342996D-08	0.7342996D-08
ISDGMR:	70	0.8729542D-07	0.8729542D-07	ISDGMR:	143	0.7297980D-08	0.7297980D-08
ISDGMR:	71	0.8607123D-07	0.8607123D-07	ISDGMR:	144	0.7218059D-08	0.7218059D-08
ISDGMR:	72	0.8441506D-07	0.8441506D-07	ISDGMR:	145	0.6989550D-08	0.6989550D-08
ISDGMR:	73	0.8397648D-07	0.8397648D-07	ISDGMR:	146	0.6672434D-08	0.6672434D-08
ISDGMR:	74	0.8314947D-07	0.8314947D-07	ISDGMR:	147	0.6558442D-08	0.6558442D-08
ISDGMR:	75	0.7992269D-07	0.7992269D-07	ISDGMR:	148	0.6482536D-08	0.6482536D-08
ISDGMR:	76	0.7806688D-07	0.7806688D-07	ISDGMR:	149	0.6374044D-08	0.6374044D-08
ISDGMR:	77	0.7598908D-07	0.7598908D-07	ISDGMR:	150	0.6332105D-08	0.6332105D-08
ISDGMR:	78	0.7173423D-07	0.7173423D-07	ISDGMR:	151	0.6147190D-08	0.6147190D-08
ISDGMR:	79	0.6902956D-07	0.6902956D-07	ISDGMR:	152	0.5723509D-08	0.5723509D-08
ISDGMR:	80	0.6785538D-07	0.6785538D-07	ISDGMR:	153	0.5357951D-08	0.5357951D-08
ISDGMR:	81	0.6666145D-07	0.6666145D-07	ISDGMR:	154	0.5224722D-08	0.5224722D-08
ISDGMR:	82	0.6290339D-07	0.6290339D-07	ISDGMR:	155	0.5005761D-08	0.5005761D-08
ISDGMR:	83	0.6165961D-07	0.6165961D-07	ISDGMR:	156	0.4797816D-08	0.4797816D-08
ISDGMR:	84	0.6118295D-07	0.6118295D-07	ISDGMR:	157	0.4696590D-08	0.4696590D-08

ISDGMR: 158	0.4626901D-08	0.4626901D-08	ISDGMR: 231	0.4722224D-09	0.4722224D-09
ISDGMR: 159	0.4521649D-08	0.4521649D-08	ISDGMR: 232	0.4544106D-09	0.4544106D-09
ISDGMR: 160	0.4359112D-08	0.4359112D-08	ISDGMR: 233	0.4455121D-09	0.4455121D-09
ISDGMR: 161	0.4225966D-08	0.4225966D-08	ISDGMR: 234	0.4419525D-09	0.4419525D-09
ISDGMR: 162	0.4046867D-08	0.4046867D-08	ISDGMR: 235	0.4370487D-09	0.4370487D-09
ISDGMR: 163	0.3895025D-08	0.3895025D-08	ISDGMR: 236	0.4296434D-09	0.4296434D-09
ISDGMR: 164	0.3799388D-08	0.3799388D-08	ISDGMR: 237	0.4079310D-09	0.4079310D-09
ISDGMR: 165	0.3706916D-08	0.3706916D-08	ISDGMR: 238	0.3869861D-09	0.3869861D-09
ISDGMR: 166	0.3610812D-08	0.3610812D-08	ISDGMR: 239	0.3742226D-09	0.3742226D-09
ISDGMR: 167	0.3546624D-08	0.3546624D-08	ISDGMR: 240	0.3709452D-09	0.3709452D-09
ISDGMR: 168	0.3453749D-08	0.3453749D-08	ISDGMR: 241	0.3643356D-09	0.3643356D-09
ISDGMR: 169	0.3406790D-08	0.3406790D-08	ISDGMR: 242	0.3517657D-09	0.3517657D-09
ISDGMR: 170	0.3295194D-08	0.3295194D-08	ISDGMR: 243	0.3391922D-09	0.3391922D-09
ISDGMR: 171	0.3247806D-08	0.3247806D-08	ISDGMR: 244	0.3288321D-09	0.3288321D-09
ISDGMR: 172	0.3217669D-08	0.3217669D-08	ISDGMR: 245	0.3226718D-09	0.3226718D-09
ISDGMR: 173	0.3148037D-08	0.3148037D-08	ISDGMR: 246	0.3181927D-09	0.3181927D-09
ISDGMR: 174	0.2993174D-08	0.2993174D-08	ISDGMR: 247	0.3124956D-09	0.3124956D-09
ISDGMR: 175	0.2784723D-08	0.2784723D-08	ISDGMR: 248	0.2936391D-09	0.2936391D-09
ISDGMR: 176	0.2703993D-08	0.2703993D-08	ISDGMR: 249	0.2660629D-09	0.2660629D-09
ISDGMR: 177	0.2664322D-08	0.2664322D-08	ISDGMR: 250	0.2508605D-09	0.2508605D-09
ISDGMR: 178	0.2616837D-08	0.2616837D-08	ISDGMR: 251	0.2377953D-09	0.2377953D-09
ISDGMR: 179	0.2518491D-08	0.2518491D-08	ISDGMR: 252	0.2339882D-09	0.2339882D-09
ISDGMR: 180	0.2466806D-08	0.2466806D-08	ISDGMR: 253	0.2305301D-09	0.2305301D-09
ISDGMR: 181	0.2386837D-08	0.2386837D-08	ISDGMR: 254	0.2260603D-09	0.2260603D-09
ISDGMR: 182	0.2264446D-08	0.2264446D-08	ISDGMR: 255	0.2087844D-09	0.2087844D-09
ISDGMR: 183	0.2208021D-08	0.2208021D-08	ISDGMR: 256	0.2008812D-09	0.2008812D-09
ISDGMR: 184	0.2181202D-08	0.2181202D-08	ISDGMR: 257	0.1966871D-09	0.1966871D-09
ISDGMR: 185	0.2132173D-08	0.2132173D-08	ISDGMR: 258	0.1932779D-09	0.1932779D-09
ISDGMR: 186	0.2117400D-08	0.2117400D-08	ISDGMR: 259	0.1875982D-09	0.1875982D-09
ISDGMR: 187	0.2089831D-08	0.2089831D-08	ISDGMR: 260	0.1795899D-09	0.1795899D-09
ISDGMR: 188	0.2052665D-08	0.2052665D-08	ISDGMR: 261	0.1735777D-09	0.1735777D-09
ISDGMR: 189	0.1994489D-08	0.1994489D-08	ISDGMR: 262	0.1671858D-09	0.1671858D-09
ISDGMR: 190	0.1994352D-08	0.1994352D-08	ISDGMR: 263	0.1637398D-09	0.1637398D-09
ISDGMR: 191	0.1906902D-08	0.1906902D-08	ISDGMR: 264	0.1614361D-09	0.1614361D-09
ISDGMR: 192	0.1883647D-08	0.1883647D-08	ISDGMR: 265	0.1515859D-09	0.1515859D-09
ISDGMR: 193	0.1876538D-08	0.1876538D-08	ISDGMR: 266	0.1384382D-09	0.1384382D-09
ISDGMR: 194	0.1835619D-08	0.1835619D-08	ISDGMR: 267	0.1241108D-09	0.1241108D-09
ISDGMR: 195	0.1769596D-08	0.1769596D-08	ISDGMR: 268	0.1224803D-09	0.1224803D-09
ISDGMR: 196	0.1760861D-08	0.1760861D-08	ISDGMR: 269	0.1188799D-09	0.1188799D-09
ISDGMR: 197	0.1689621D-08	0.1689621D-08	ISDGMR: 270	0.1155517D-09	0.1155517D-09
ISDGMR: 198	0.1625145D-08	0.1625145D-08	ISDGMR: 271	0.1110654D-09	0.1110654D-09
ISDGMR: 199	0.1617016D-08	0.1617016D-08	ISDGMR: 272	0.1023201D-09	0.1023201D-09
ISDGMR: 200	0.1563566D-08	0.1563566D-08	ISDGMR: 273	0.9857884D-10	0.9857884D-10
ISDGMR: 201	0.1534008D-08	0.1534008D-08	IErr=	0 Err= 9.86D-11 NSaved= 6 NIter= 273 NITot= 280.	
ISDGMR: 202	0.1484432D-08	0.1484432D-08	PS=	192.000000000002 PSN= 192.000000000000 RNE=	
ISDGMR: 203	0.1425819D-08	0.1425819D-08		192.000000000000 Err= 5.92D-16	
ISDGMR: 204	0.1247362D-08	0.1247362D-08	ItDFit: ISolve= 4 NSavIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=		
ISDGMR: 205	0.1129065D-08	0.1129065D-08	1000 IStorA=2		
ISDGMR: 206	0.1084253D-08	0.1084253D-08	Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.72D+03 BPNorm= 7.03D+01		
ISDGMR: 207	0.1039210D-08	0.1039210D-08	Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10		
ISDGMR: 208	0.1007767D-08	0.1007767D-08	Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=		
ISDGMR: 209	0.9799625D-09	0.9799625D-09	744 KMP= 744		
ISDGMR: 210	0.9188668D-09	0.9188668D-09	Iter Natral Err Est Error Estimate		
ISDGMR: 211	0.8912178D-09	0.8912178D-09	ISDGMR: 0	0.3034359D-04	0.3034359D-04
ISDGMR: 212	0.8403488D-09	0.8403488D-09	ISDGMR: 1	0.2428709D-04	0.2428709D-04
ISDGMR: 213	0.8343241D-09	0.8343241D-09	ISDGMR: 2	0.9269428D-05	0.9269428D-05
ISDGMR: 214	0.8031381D-09	0.8031381D-09	ISDGMR: 3	0.4803083D-05	0.4803083D-05
ISDGMR: 215	0.7692365D-09	0.7692365D-09	ISDGMR: 4	0.3281062D-05	0.3281062D-05
ISDGMR: 216	0.7416317D-09	0.7416317D-09	ISDGMR: 5	0.2784819D-05	0.2784819D-05
ISDGMR: 217	0.7102845D-09	0.7102845D-09	ISDGMR: 6	0.2458324D-05	0.2458324D-05
ISDGMR: 218	0.6818135D-09	0.6818135D-09	ISDGMR: 7	0.2250213D-05	0.2250213D-05
ISDGMR: 219	0.6461931D-09	0.6461931D-09	ISDGMR: 8	0.2079967D-05	0.2079967D-05
ISDGMR: 220	0.6157038D-09	0.6157038D-09	ISDGMR: 9	0.1803771D-05	0.1803771D-05
ISDGMR: 221	0.5921361D-09	0.5921361D-09	ISDGMR: 10	0.1630051D-05	0.1630051D-05
ISDGMR: 222	0.5771737D-09	0.5771737D-09	ISDGMR: 11	0.1337360D-05	0.1337360D-05
ISDGMR: 223	0.5602369D-09	0.5602369D-09	ISDGMR: 12	0.1265496D-05	0.1265496D-05
ISDGMR: 224	0.5363900D-09	0.5363900D-09	ISDGMR: 13	0.1116726D-05	0.1116726D-05
ISDGMR: 225	0.5274915D-09	0.5274915D-09	ISDGMR: 14	0.1000669D-05	0.1000669D-05
ISDGMR: 226	0.5106829D-09	0.5106829D-09	ISDGMR: 15	0.9031473D-06	0.9031473D-06
ISDGMR: 227	0.5048046D-09	0.5048046D-09	ISDGMR: 16	0.8451878D-06	0.8451878D-06
ISDGMR: 228	0.4869886D-09	0.4869886D-09	ISDGMR: 17	0.7564748D-06	0.7564748D-06
ISDGMR: 229	0.4868198D-09	0.4868198D-09	ISDGMR: 18	0.6667692D-06	0.6667692D-06
ISDGMR: 230	0.4840905D-09	0.4840905D-09	ISDGMR: 19	0.5553377D-06	0.5553377D-06

ISDGMR:	20	0.5343999D-06	0.5343999D-06	ISDGMR:	93	0.3402121D-07	0.3402121D-07
ISDGMR:	21	0.5165133D-06	0.5165133D-06	ISDGMR:	94	0.3342801D-07	0.3342801D-07
ISDGMR:	22	0.4984109D-06	0.4984109D-06	ISDGMR:	95	0.3250496D-07	0.3250496D-07
ISDGMR:	23	0.4474748D-06	0.4474748D-06	ISDGMR:	96	0.3194598D-07	0.3194598D-07
ISDGMR:	24	0.3890851D-06	0.3890851D-06	ISDGMR:	97	0.3098157D-07	0.3098157D-07
ISDGMR:	25	0.3549517D-06	0.3549517D-06	ISDGMR:	98	0.2848493D-07	0.2848493D-07
ISDGMR:	26	0.3129141D-06	0.3129141D-06	ISDGMR:	99	0.2559967D-07	0.2559967D-07
ISDGMR:	27	0.2584608D-06	0.2584608D-06	ISDGMR:	100	0.2339224D-07	0.2339224D-07
ISDGMR:	28	0.2248400D-06	0.2248400D-06	ISDGMR:	101	0.2183039D-07	0.2183039D-07
ISDGMR:	29	0.2013721D-06	0.2013721D-06	ISDGMR:	102	0.2062667D-07	0.2062667D-07
ISDGMR:	30	0.1901352D-06	0.1901352D-06	ISDGMR:	103	0.1968460D-07	0.1968460D-07
ISDGMR:	31	0.1812423D-06	0.1812423D-06	ISDGMR:	104	0.1889392D-07	0.1889392D-07
ISDGMR:	32	0.1758226D-06	0.1758226D-06	ISDGMR:	105	0.1799888D-07	0.1799888D-07
ISDGMR:	33	0.1737808D-06	0.1737808D-06	ISDGMR:	106	0.1703440D-07	0.1703440D-07
ISDGMR:	34	0.1706361D-06	0.1706361D-06	ISDGMR:	107	0.1612905D-07	0.1612905D-07
ISDGMR:	35	0.1585001D-06	0.1585001D-06	ISDGMR:	108	0.1538504D-07	0.1538504D-07
ISDGMR:	36	0.1469510D-06	0.1469510D-06	ISDGMR:	109	0.1455500D-07	0.1455500D-07
ISDGMR:	37	0.1371655D-06	0.1371655D-06	ISDGMR:	110	0.1388761D-07	0.1388761D-07
ISDGMR:	38	0.1318789D-06	0.1318789D-06	ISDGMR:	111	0.1329292D-07	0.1329292D-07
ISDGMR:	39	0.1284179D-06	0.1284179D-06	ISDGMR:	112	0.1250602D-07	0.1250602D-07
ISDGMR:	40	0.1260848D-06	0.1260848D-06	ISDGMR:	113	0.1202146D-07	0.1202146D-07
ISDGMR:	41	0.1238513D-06	0.1238513D-06	ISDGMR:	114	0.1134070D-07	0.1134070D-07
ISDGMR:	42	0.1220741D-06	0.1220741D-06	ISDGMR:	115	0.1076946D-07	0.1076946D-07
ISDGMR:	43	0.1179347D-06	0.1179347D-06	ISDGMR:	116	0.1055168D-07	0.1055168D-07
ISDGMR:	44	0.1152059D-06	0.1152059D-06	ISDGMR:	117	0.1026700D-07	0.1026700D-07
ISDGMR:	45	0.1131447D-06	0.1131447D-06	ISDGMR:	118	0.9622855D-08	0.9622855D-08
ISDGMR:	46	0.1110378D-06	0.1110378D-06	ISDGMR:	119	0.9117862D-08	0.9117862D-08
ISDGMR:	47	0.1071843D-06	0.1071843D-06	ISDGMR:	120	0.8969927D-08	0.8969927D-08
ISDGMR:	48	0.1036404D-06	0.1036404D-06	ISDGMR:	121	0.8503918D-08	0.8503918D-08
ISDGMR:	49	0.1015298D-06	0.1015298D-06	ISDGMR:	122	0.8304648D-08	0.8304648D-08
ISDGMR:	50	0.9907684D-07	0.9907684D-07	ISDGMR:	123	0.8002266D-08	0.8002266D-08
ISDGMR:	51	0.9594796D-07	0.9594796D-07	ISDGMR:	124	0.7347706D-08	0.7347706D-08
ISDGMR:	52	0.8993542D-07	0.8993542D-07	ISDGMR:	125	0.7155543D-08	0.7155543D-08
ISDGMR:	53	0.8368326D-07	0.8368326D-07	ISDGMR:	126	0.6988572D-08	0.6988572D-08
ISDGMR:	54	0.8306722D-07	0.8306722D-07	ISDGMR:	127	0.6950352D-08	0.6950352D-08
ISDGMR:	55	0.8283791D-07	0.8283791D-07	ISDGMR:	128	0.6769347D-08	0.6769347D-08
ISDGMR:	56	0.8191832D-07	0.8191832D-07	ISDGMR:	129	0.6686061D-08	0.6686061D-08
ISDGMR:	57	0.7976497D-07	0.7976497D-07	ISDGMR:	130	0.6414988D-08	0.6414988D-08
ISDGMR:	58	0.7633784D-07	0.7633784D-07	ISDGMR:	131	0.6387605D-08	0.6387605D-08
ISDGMR:	59	0.7477521D-07	0.7477521D-07	ISDGMR:	132	0.6378865D-08	0.6378865D-08
ISDGMR:	60	0.7452472D-07	0.7452472D-07	ISDGMR:	133	0.6316835D-08	0.6316835D-08
ISDGMR:	61	0.7304461D-07	0.7304461D-07	ISDGMR:	134	0.6110840D-08	0.6110840D-08
ISDGMR:	62	0.7230772D-07	0.7230772D-07	ISDGMR:	135	0.6084200D-08	0.6084200D-08
ISDGMR:	63	0.7205164D-07	0.7205164D-07	ISDGMR:	136	0.6026107D-08	0.6026107D-08
ISDGMR:	64	0.7095036D-07	0.7095036D-07	ISDGMR:	137	0.5830400D-08	0.5830400D-08
ISDGMR:	65	0.6914706D-07	0.6914706D-07	ISDGMR:	138	0.5744361D-08	0.5744361D-08
ISDGMR:	66	0.6700238D-07	0.6700238D-07	ISDGMR:	139	0.5706051D-08	0.5706051D-08
ISDGMR:	67	0.6641287D-07	0.6641287D-07	ISDGMR:	140	0.5611839D-08	0.5611839D-08
ISDGMR:	68	0.6593419D-07	0.6593419D-07	ISDGMR:	141	0.5547875D-08	0.5547875D-08
ISDGMR:	69	0.6516162D-07	0.6516162D-07	ISDGMR:	142	0.5483239D-08	0.5483239D-08
ISDGMR:	70	0.6481695D-07	0.6481695D-07	ISDGMR:	143	0.5267339D-08	0.5267339D-08
ISDGMR:	71	0.6391457D-07	0.6391457D-07	ISDGMR:	144	0.5103050D-08	0.5103050D-08
ISDGMR:	72	0.6255348D-07	0.6255348D-07	ISDGMR:	145	0.5040461D-08	0.5040461D-08
ISDGMR:	73	0.6148648D-07	0.6148648D-07	ISDGMR:	146	0.4923077D-08	0.4923077D-08
ISDGMR:	74	0.6098630D-07	0.6098630D-07	ISDGMR:	147	0.4677452D-08	0.4677452D-08
ISDGMR:	75	0.5925026D-07	0.5925026D-07	ISDGMR:	148	0.4404945D-08	0.4404945D-08
ISDGMR:	76	0.5566357D-07	0.5566357D-07	ISDGMR:	149	0.4298643D-08	0.4298643D-08
ISDGMR:	77	0.5352261D-07	0.5352261D-07	ISDGMR:	150	0.4070248D-08	0.4070248D-08
ISDGMR:	78	0.5350037D-07	0.5350037D-07	ISDGMR:	151	0.4066076D-08	0.4066076D-08
ISDGMR:	79	0.5158455D-07	0.5158455D-07	ISDGMR:	152	0.4047251D-08	0.4047251D-08
ISDGMR:	80	0.4927010D-07	0.4927010D-07	ISDGMR:	153	0.3740552D-08	0.3740552D-08
ISDGMR:	81	0.4748140D-07	0.4748140D-07	ISDGMR:	154	0.3590371D-08	0.3590371D-08
ISDGMR:	82	0.4735255D-07	0.4735255D-07	ISDGMR:	155	0.3408562D-08	0.3408562D-08
ISDGMR:	83	0.4534885D-07	0.4534885D-07	ISDGMR:	156	0.3375452D-08	0.3375452D-08
ISDGMR:	84	0.4336174D-07	0.4336174D-07	ISDGMR:	157	0.3329693D-08	0.3329693D-08
ISDGMR:	85	0.4282346D-07	0.4282346D-07	ISDGMR:	158	0.3291782D-08	0.3291782D-08
ISDGMR:	86	0.4246487D-07	0.4246487D-07	ISDGMR:	159	0.3209778D-08	0.3209778D-08
ISDGMR:	87	0.4105330D-07	0.4105330D-07	ISDGMR:	160	0.3086636D-08	0.3086636D-08
ISDGMR:	88	0.3956607D-07	0.3956607D-07	ISDGMR:	161	0.2987228D-08	0.2987228D-08
ISDGMR:	89	0.3833934D-07	0.3833934D-07	ISDGMR:	162	0.2853982D-08	0.2853982D-08
ISDGMR:	90	0.3715480D-07	0.3715480D-07	ISDGMR:	163	0.2780833D-08	0.2780833D-08
ISDGMR:	91	0.3615719D-07	0.3615719D-07	ISDGMR:	164	0.2758587D-08	0.2758587D-08
ISDGMR:	92	0.3460443D-07	0.3460443D-07	ISDGMR:	165	0.2711783D-08	0.2711783D-08

```

ISDGMR: 166 0.2702545D-08 0.2702545D-08
ISDGMR: 167 0.2580109D-08 0.2580109D-08
ISDGMR: 168 0.2461218D-08 0.2461218D-08
ISDGMR: 169 0.2428299D-08 0.2428299D-08
ISDGMR: 170 0.2368979D-08 0.2368979D-08
ISDGMR: 171 0.2338682D-08 0.2338682D-08
ISDGMR: 172 0.2278053D-08 0.2278053D-08
ISDGMR: 173 0.2210119D-08 0.2210119D-08
ISDGMR: 174 0.2108002D-08 0.2108002D-08
ISDGMR: 175 0.2063025D-08 0.2063025D-08
ISDGMR: 176 0.1980019D-08 0.1980019D-08
ISDGMR: 177 0.1951491D-08 0.1951491D-08
ISDGMR: 178 0.1899847D-08 0.1899847D-08
ISDGMR: 179 0.1844011D-08 0.1844011D-08
ISDGMR: 180 0.1813413D-08 0.1813413D-08
ISDGMR: 181 0.1758643D-08 0.1758643D-08
ISDGMR: 182 0.1688420D-08 0.1688420D-08
ISDGMR: 183 0.1587241D-08 0.1587241D-08
ISDGMR: 184 0.1571554D-08 0.1571554D-08
ISDGMR: 185 0.1482648D-08 0.1482648D-08
ISDGMR: 186 0.1465985D-08 0.1465985D-08
ISDGMR: 187 0.1431750D-08 0.1431750D-08
ISDGMR: 188 0.1392742D-08 0.1392742D-08
ISDGMR: 189 0.1344080D-08 0.1344080D-08
ISDGMR: 190 0.1311823D-08 0.1311823D-08
ISDGMR: 191 0.1284254D-08 0.1284254D-08
ISDGMR: 192 0.1250962D-08 0.1250962D-08
ISDGMR: 193 0.1231530D-08 0.1231530D-08
ISDGMR: 194 0.1193539D-08 0.1193539D-08
ISDGMR: 195 0.1163619D-08 0.1163619D-08
ISDGMR: 196 0.1124035D-08 0.1124035D-08
ISDGMR: 197 0.1089189D-08 0.1089189D-08
ISDGMR: 198 0.1085648D-08 0.1085648D-08
ISDGMR: 199 0.1074489D-08 0.1074489D-08
ISDGMR: 200 0.1053086D-08 0.1053086D-08
ISDGMR: 201 0.1005723D-08 0.1005723D-08
ISDGMR: 202 0.9676466D-09 0.9676466D-09
ISDGMR: 203 0.8908704D-09 0.8908704D-09
ISDGMR: 204 0.8472660D-09 0.8472660D-09
ISDGMR: 205 0.8080417D-09 0.8080417D-09
ISDGMR: 206 0.7335295D-09 0.7335295D-09
ISDGMR: 207 0.6941689D-09 0.6941689D-09
ISDGMR: 208 0.6589924D-09 0.6589924D-09
ISDGMR: 209 0.6241942D-09 0.6241942D-09
ISDGMR: 210 0.6082990D-09 0.6082990D-09
ISDGMR: 211 0.5827507D-09 0.5827507D-09
ISDGMR: 212 0.5506579D-09 0.5506579D-09
ISDGMR: 213 0.5258626D-09 0.5258626D-09
ISDGMR: 214 0.5079785D-09 0.5079785D-09
ISDGMR: 215 0.4991473D-09 0.4991473D-09
ISDGMR: 216 0.4901077D-09 0.4901077D-09
ISDGMR: 217 0.4790093D-09 0.4790093D-09
ISDGMR: 218 0.4710389D-09 0.4710389D-09
ISDGMR: 219 0.4615324D-09 0.4615324D-09
ISDGMR: 220 0.4571694D-09 0.4571694D-09
ISDGMR: 221 0.4368290D-09 0.4368290D-09
ISDGMR: 222 0.4230198D-09 0.4230198D-09
ISDGMR: 223 0.4200552D-09 0.4200552D-09
ISDGMR: 224 0.4062125D-09 0.4062125D-09
ISDGMR: 225 0.3991237D-09 0.3991237D-09
ISDGMR: 226 0.3899749D-09 0.3899749D-09
ISDGMR: 227 0.3764211D-09 0.3764211D-09
ISDGMR: 228 0.3641110D-09 0.3641110D-09
ISDGMR: 229 0.3558300D-09 0.3558300D-09
ISDGMR: 230 0.3513234D-09 0.3513234D-09
ISDGMR: 231 0.3413479D-09 0.3413479D-09
ISDGMR: 232 0.3284241D-09 0.3284241D-09
ISDGMR: 233 0.3208267D-09 0.3208267D-09
ISDGMR: 234 0.3117952D-09 0.3117952D-09
ISDGMR: 235 0.3060128D-09 0.3060128D-09
ISDGMR: 236 0.3013630D-09 0.3013630D-09
ISDGMR: 237 0.2931856D-09 0.2931856D-09
ISDGMR: 238 0.2826833D-09 0.2826833D-09
ISDGMR: 239 0.2693031D-09 0.2693031D-09
ISDGMR: 240 0.2512100D-09 0.2512100D-09
ISDGMR: 241 0.2431025D-09 0.2431025D-09
ISDGMR: 242 0.2382648D-09 0.2382648D-09
ISDGMR: 243 0.2309855D-09 0.2309855D-09
ISDGMR: 244 0.2257411D-09 0.2257411D-09
ISDGMR: 245 0.2087846D-09 0.2087846D-09
ISDGMR: 246 0.1977179D-09 0.1977179D-09
ISDGMR: 247 0.1957954D-09 0.1957954D-09
ISDGMR: 248 0.1946747D-09 0.1946747D-09
ISDGMR: 249 0.1923127D-09 0.1923127D-09
ISDGMR: 250 0.1827240D-09 0.1827240D-09
ISDGMR: 251 0.1738347D-09 0.1738347D-09
ISDGMR: 252 0.1669447D-09 0.1669447D-09
ISDGMR: 253 0.1651099D-09 0.1651099D-09
ISDGMR: 254 0.1630231D-09 0.1630231D-09
ISDGMR: 255 0.1518195D-09 0.1518195D-09
ISDGMR: 256 0.1363252D-09 0.1363252D-09
ISDGMR: 257 0.1315935D-09 0.1315935D-09
ISDGMR: 258 0.1289416D-09 0.1289416D-09
ISDGMR: 259 0.1234219D-09 0.1234219D-09
ISDGMR: 260 0.1212344D-09 0.1212344D-09
ISDGMR: 261 0.1113873D-09 0.1113873D-09
ISDGMR: 262 0.1016436D-09 0.1016436D-09
ISDGMR: 263 0.9273373D-10 0.9273373D-10
IErr= 0 Err= 9.27D-11 NSaved= 6 NIter= 263 NITot= 270.
PS= 192.00000000000000 Err=-5.92D-16
192.00000000000000 Err=-5.92D-16
EnCoef did 5 forward-backward iterations
ItDFit: ISolve= 4 NSavIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=
1000 IStorA=2
Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.72D+03 BPNorm= 7.03D+01
Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10
Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=
744 KMP= 744
Iter Natral Err Est Error Estimate
ISDGMR: 0 0.9620950D-05 0.9620950D-05
ISDGMR: 1 0.5088334D-05 0.5088334D-05
ISDGMR: 2 0.2187733D-05 0.2187733D-05
ISDGMR: 3 0.1164308D-05 0.1164308D-05
ISDGMR: 4 0.7583268D-06 0.7583268D-06
ISDGMR: 5 0.5435529D-06 0.5435529D-06
ISDGMR: 6 0.4487224D-06 0.4487224D-06
ISDGMR: 7 0.4060556D-06 0.4060556D-06
ISDGMR: 8 0.3723087D-06 0.3723087D-06
ISDGMR: 9 0.3002845D-06 0.3002845D-06
ISDGMR: 10 0.2537818D-06 0.2537818D-06
ISDGMR: 11 0.2267265D-06 0.2267265D-06
ISDGMR: 12 0.2009531D-06 0.2009531D-06
ISDGMR: 13 0.1903324D-06 0.1903324D-06
ISDGMR: 14 0.1785044D-06 0.1785044D-06
ISDGMR: 15 0.1661382D-06 0.1661382D-06
ISDGMR: 16 0.1455676D-06 0.1455676D-06
ISDGMR: 17 0.1356006D-06 0.1356006D-06
ISDGMR: 18 0.1216479D-06 0.1216479D-06
ISDGMR: 19 0.1102554D-06 0.1102554D-06
ISDGMR: 20 0.9364211D-07 0.9364211D-07
ISDGMR: 21 0.8604009D-07 0.8604009D-07
ISDGMR: 22 0.8114210D-07 0.8114210D-07
ISDGMR: 23 0.7376322D-07 0.7376322D-07
ISDGMR: 24 0.6859716D-07 0.6859716D-07
ISDGMR: 25 0.6533774D-07 0.6533774D-07
ISDGMR: 26 0.6333397D-07 0.6333397D-07
ISDGMR: 27 0.5912919D-07 0.5912919D-07
ISDGMR: 28 0.5176101D-07 0.5176101D-07
ISDGMR: 29 0.4959819D-07 0.4959819D-07
ISDGMR: 30 0.4585354D-07 0.4585354D-07
ISDGMR: 31 0.4200914D-07 0.4200914D-07
ISDGMR: 32 0.4106259D-07 0.4106259D-07
ISDGMR: 33 0.4083493D-07 0.4083493D-07
ISDGMR: 34 0.3986974D-07 0.3986974D-07
ISDGMR: 35 0.3770351D-07 0.3770351D-07
ISDGMR: 36 0.3499131D-07 0.3499131D-07

```

ISDGMR:	37	0.3371875D-07	0.3371875D-07	ISDGMR:	110	0.3670703D-08	0.3670703D-08
ISDGMR:	38	0.3246870D-07	0.3246870D-07	ISDGMR:	111	0.3556097D-08	0.3556097D-08
ISDGMR:	39	0.3146763D-07	0.3146763D-07	ISDGMR:	112	0.3283694D-08	0.3283694D-08
ISDGMR:	40	0.3024506D-07	0.3024506D-07	ISDGMR:	113	0.3023968D-08	0.3023968D-08
ISDGMR:	41	0.2886508D-07	0.2886508D-07	ISDGMR:	114	0.2893040D-08	0.2893040D-08
ISDGMR:	42	0.2673545D-07	0.2673545D-07	ISDGMR:	115	0.2830046D-08	0.2830046D-08
ISDGMR:	43	0.2617411D-07	0.2617411D-07	ISDGMR:	116	0.2659720D-08	0.2659720D-08
ISDGMR:	44	0.2593255D-07	0.2593255D-07	ISDGMR:	117	0.2614229D-08	0.2614229D-08
ISDGMR:	45	0.2507187D-07	0.2507187D-07	ISDGMR:	118	0.2528254D-08	0.2528254D-08
ISDGMR:	46	0.2461503D-07	0.2461503D-07	ISDGMR:	119	0.2457418D-08	0.2457418D-08
ISDGMR:	47	0.2404507D-07	0.2404507D-07	ISDGMR:	120	0.2371977D-08	0.2371977D-08
ISDGMR:	48	0.2331910D-07	0.2331910D-07	ISDGMR:	121	0.2311146D-08	0.2311146D-08
ISDGMR:	49	0.2290514D-07	0.2290514D-07	ISDGMR:	122	0.2226792D-08	0.2226792D-08
ISDGMR:	50	0.2232007D-07	0.2232007D-07	ISDGMR:	123	0.2154030D-08	0.2154030D-08
ISDGMR:	51	0.2178325D-07	0.2178325D-07	ISDGMR:	124	0.2113058D-08	0.2113058D-08
ISDGMR:	52	0.2123537D-07	0.2123537D-07	ISDGMR:	125	0.2039338D-08	0.2039338D-08
ISDGMR:	53	0.2086942D-07	0.2086942D-07	ISDGMR:	126	0.1951364D-08	0.1951364D-08
ISDGMR:	54	0.2046729D-07	0.2046729D-07	ISDGMR:	127	0.1932828D-08	0.1932828D-08
ISDGMR:	55	0.2007610D-07	0.2007610D-07	ISDGMR:	128	0.1885076D-08	0.1885076D-08
ISDGMR:	56	0.1972259D-07	0.1972259D-07	ISDGMR:	129	0.1783563D-08	0.1783563D-08
ISDGMR:	57	0.1891367D-07	0.1891367D-07	ISDGMR:	130	0.1687819D-08	0.1687819D-08
ISDGMR:	58	0.1832520D-07	0.1832520D-07	ISDGMR:	131	0.1630428D-08	0.1630428D-08
ISDGMR:	59	0.1821988D-07	0.1821988D-07	ISDGMR:	132	0.1606107D-08	0.1606107D-08
ISDGMR:	60	0.1793623D-07	0.1793623D-07	ISDGMR:	133	0.1597243D-08	0.1597243D-08
ISDGMR:	61	0.1750188D-07	0.1750188D-07	ISDGMR:	134	0.1560878D-08	0.1560878D-08
ISDGMR:	62	0.1721086D-07	0.1721086D-07	ISDGMR:	135	0.1547728D-08	0.1547728D-08
ISDGMR:	63	0.1713021D-07	0.1713021D-07	ISDGMR:	136	0.1496388D-08	0.1496388D-08
ISDGMR:	64	0.1708791D-07	0.1708791D-07	ISDGMR:	137	0.1460872D-08	0.1460872D-08
ISDGMR:	65	0.1700644D-07	0.1700644D-07	ISDGMR:	138	0.1455498D-08	0.1455498D-08
ISDGMR:	66	0.1688703D-07	0.1688703D-07	ISDGMR:	139	0.1455106D-08	0.1455106D-08
ISDGMR:	67	0.1638351D-07	0.1638351D-07	ISDGMR:	140	0.1420835D-08	0.1420835D-08
ISDGMR:	68	0.1625843D-07	0.1625843D-07	ISDGMR:	141	0.1379466D-08	0.1379466D-08
ISDGMR:	69	0.1625843D-07	0.1625843D-07	ISDGMR:	142	0.1364125D-08	0.1364125D-08
ISDGMR:	70	0.1615356D-07	0.1615356D-07	ISDGMR:	143	0.1352310D-08	0.1352310D-08
ISDGMR:	71	0.1559743D-07	0.1559743D-07	ISDGMR:	144	0.1338165D-08	0.1338165D-08
ISDGMR:	72	0.1500535D-07	0.1500535D-07	ISDGMR:	145	0.1304773D-08	0.1304773D-08
ISDGMR:	73	0.1468600D-07	0.1468600D-07	ISDGMR:	146	0.1249807D-08	0.1249807D-08
ISDGMR:	74	0.1436369D-07	0.1436369D-07	ISDGMR:	147	0.1226350D-08	0.1226350D-08
ISDGMR:	75	0.1396840D-07	0.1396840D-07	ISDGMR:	148	0.1201067D-08	0.1201067D-08
ISDGMR:	76	0.1329898D-07	0.1329898D-07	ISDGMR:	149	0.1160593D-08	0.1160593D-08
ISDGMR:	77	0.1305140D-07	0.1305140D-07	ISDGMR:	150	0.1096395D-08	0.1096395D-08
ISDGMR:	78	0.1255363D-07	0.1255363D-07	ISDGMR:	151	0.1091076D-08	0.1091076D-08
ISDGMR:	79	0.1182251D-07	0.1182251D-07	ISDGMR:	152	0.1089024D-08	0.1089024D-08
ISDGMR:	80	0.1116645D-07	0.1116645D-07	ISDGMR:	153	0.1084021D-08	0.1084021D-08
ISDGMR:	81	0.1080093D-07	0.1080093D-07	ISDGMR:	154	0.1052170D-08	0.1052170D-08
ISDGMR:	82	0.1055309D-07	0.1055309D-07	ISDGMR:	155	0.1023036D-08	0.1023036D-08
ISDGMR:	83	0.1028935D-07	0.1028935D-07	ISDGMR:	156	0.1010844D-08	0.1010844D-08
ISDGMR:	84	0.9975115D-08	0.9975115D-08	ISDGMR:	157	0.1004502D-08	0.1004502D-08
ISDGMR:	85	0.9668891D-08	0.9668891D-08	ISDGMR:	158	0.9950574D-09	0.9950574D-09
ISDGMR:	86	0.9286524D-08	0.9286524D-08	ISDGMR:	159	0.9632538D-09	0.9632538D-09
ISDGMR:	87	0.8829781D-08	0.8829781D-08	ISDGMR:	160	0.9502223D-09	0.9502223D-09
ISDGMR:	88	0.8662560D-08	0.8662560D-08	ISDGMR:	161	0.8953077D-09	0.8953077D-09
ISDGMR:	89	0.8404249D-08	0.8404249D-08	ISDGMR:	162	0.8520564D-09	0.8520564D-09
ISDGMR:	90	0.8156505D-08	0.8156505D-08	ISDGMR:	163	0.8438882D-09	0.8438882D-09
ISDGMR:	91	0.7944442D-08	0.7944442D-08	ISDGMR:	164	0.8231776D-09	0.8231776D-09
ISDGMR:	92	0.7719950D-08	0.7719950D-08	ISDGMR:	165	0.7991727D-09	0.7991727D-09
ISDGMR:	93	0.7517901D-08	0.7517901D-08	ISDGMR:	166	0.7576862D-09	0.7576862D-09
ISDGMR:	94	0.7461225D-08	0.7461225D-08	ISDGMR:	167	0.7316294D-09	0.7316294D-09
ISDGMR:	95	0.7236054D-08	0.7236054D-08	ISDGMR:	168	0.7104620D-09	0.7104620D-09
ISDGMR:	96	0.6819577D-08	0.6819577D-08	ISDGMR:	169	0.7005458D-09	0.7005458D-09
ISDGMR:	97	0.6625404D-08	0.6625404D-08	ISDGMR:	170	0.6696200D-09	0.6696200D-09
ISDGMR:	98	0.6455161D-08	0.6455161D-08	ISDGMR:	171	0.6171057D-09	0.6171057D-09
ISDGMR:	99	0.6143572D-08	0.6143572D-08	ISDGMR:	172	0.5908355D-09	0.5908355D-09
ISDGMR:	100	0.6030610D-08	0.6030610D-08	ISDGMR:	173	0.5618427D-09	0.5618427D-09
ISDGMR:	101	0.5950046D-08	0.5950046D-08	ISDGMR:	174	0.5477041D-09	0.5477041D-09
ISDGMR:	102	0.5848591D-08	0.5848591D-08	ISDGMR:	175	0.5251380D-09	0.5251380D-09
ISDGMR:	103	0.5751298D-08	0.5751298D-08	ISDGMR:	176	0.5096628D-09	0.5096628D-09
ISDGMR:	104	0.5520245D-08	0.5520245D-08	ISDGMR:	177	0.4695947D-09	0.4695947D-09
ISDGMR:	105	0.5192308D-08	0.5192308D-08	ISDGMR:	178	0.4621910D-09	0.4621910D-09
ISDGMR:	106	0.4595588D-08	0.4595588D-08	ISDGMR:	179	0.4459450D-09	0.4459450D-09
ISDGMR:	107	0.4394132D-08	0.4394132D-08	ISDGMR:	180	0.4301167D-09	0.4301167D-09
ISDGMR:	108	0.4108352D-08	0.4108352D-08	ISDGMR:	181	0.4052483D-09	0.4052483D-09
ISDGMR:	109	0.3804840D-08	0.3804840D-08	ISDGMR:	182	0.3826263D-09	0.3826263D-09

ISDGMR: 183	0.3527496D-09	0.3527496D-09	ISDGMR: 20	0.5474407D-07	0.5474407D-07
ISDGMR: 184	0.3375322D-09	0.3375322D-09	ISDGMR: 21	0.5092864D-07	0.5092864D-07
ISDGMR: 185	0.3306532D-09	0.3306532D-09	ISDGMR: 22	0.4814569D-07	0.4814569D-07
ISDGMR: 186	0.3289613D-09	0.3289613D-09	ISDGMR: 23	0.4303106D-07	0.4303106D-07
ISDGMR: 187	0.3268769D-09	0.3268769D-09	ISDGMR: 24	0.4070423D-07	0.4070423D-07
ISDGMR: 188	0.3173053D-09	0.3173053D-09	ISDGMR: 25	0.3906117D-07	0.3906117D-07
ISDGMR: 189	0.3025481D-09	0.3025481D-09	ISDGMR: 26	0.3702849D-07	0.3702849D-07
ISDGMR: 190	0.2973105D-09	0.2973105D-09	ISDGMR: 27	0.3204415D-07	0.3204415D-07
ISDGMR: 191	0.2879658D-09	0.2879658D-09	ISDGMR: 28	0.2902692D-07	0.2902692D-07
ISDGMR: 192	0.2854677D-09	0.2854677D-09	ISDGMR: 29	0.2732408D-07	0.2732408D-07
ISDGMR: 193	0.2840121D-09	0.2840121D-09	ISDGMR: 30	0.2561804D-07	0.2561804D-07
ISDGMR: 194	0.2776783D-09	0.2776783D-09	ISDGMR: 31	0.2500873D-07	0.2500873D-07
ISDGMR: 195	0.2715307D-09	0.2715307D-09	ISDGMR: 32	0.2373685D-07	0.2373685D-07
ISDGMR: 196	0.2612603D-09	0.2612603D-09	ISDGMR: 33	0.2240895D-07	0.2240895D-07
ISDGMR: 197	0.2510861D-09	0.2510861D-09	ISDGMR: 34	0.2113516D-07	0.2113516D-07
ISDGMR: 198	0.2495014D-09	0.2495014D-09	ISDGMR: 35	0.1961428D-07	0.1961428D-07
ISDGMR: 199	0.2444159D-09	0.2444159D-09	ISDGMR: 36	0.1835151D-07	0.1835151D-07
ISDGMR: 200	0.2347358D-09	0.2347358D-09	ISDGMR: 37	0.1762123D-07	0.1762123D-07
ISDGMR: 201	0.2314871D-09	0.2314871D-09	ISDGMR: 38	0.1713815D-07	0.1713815D-07
ISDGMR: 202	0.2177849D-09	0.2177849D-09	ISDGMR: 39	0.1666372D-07	0.1666372D-07
ISDGMR: 203	0.2136070D-09	0.2136070D-09	ISDGMR: 40	0.1617963D-07	0.1617963D-07
ISDGMR: 204	0.2120026D-09	0.2120026D-09	ISDGMR: 41	0.1574441D-07	0.1574441D-07
ISDGMR: 205	0.2058365D-09	0.2058365D-09	ISDGMR: 42	0.1506859D-07	0.1506859D-07
ISDGMR: 206	0.1972158D-09	0.1972158D-09	ISDGMR: 43	0.1444664D-07	0.1444664D-07
ISDGMR: 207	0.1931219D-09	0.1931219D-09	ISDGMR: 44	0.1403273D-07	0.1403273D-07
ISDGMR: 208	0.1808261D-09	0.1808261D-09	ISDGMR: 45	0.1345189D-07	0.1345189D-07
ISDGMR: 209	0.1737635D-09	0.1737635D-09	ISDGMR: 46	0.1253828D-07	0.1253828D-07
ISDGMR: 210	0.1632628D-09	0.1632628D-09	ISDGMR: 47	0.1205894D-07	0.1205894D-07
ISDGMR: 211	0.1514226D-09	0.1514226D-09	ISDGMR: 48	0.1165091D-07	0.1165091D-07
ISDGMR: 212	0.1359399D-09	0.1359399D-09	ISDGMR: 49	0.1145347D-07	0.1145347D-07
ISDGMR: 213	0.1310589D-09	0.1310589D-09	ISDGMR: 50	0.1107103D-07	0.1107103D-07
ISDGMR: 214	0.1232912D-09	0.1232912D-09	ISDGMR: 51	0.1074126D-07	0.1074126D-07
ISDGMR: 215	0.1215066D-09	0.1215066D-09	ISDGMR: 52	0.1029335D-07	0.1029335D-07
ISDGMR: 216	0.1158555D-09	0.1158555D-09	ISDGMR: 53	0.1003959D-07	0.1003959D-07
ISDGMR: 217	0.1101019D-09	0.1101019D-09	ISDGMR: 54	0.9914990D-08	0.9914990D-08
ISDGMR: 218	0.1088984D-09	0.1088984D-09	ISDGMR: 55	0.9822792D-08	0.9822792D-08
ISDGMR: 219	0.1074548D-09	0.1074548D-09	ISDGMR: 56	0.9683507D-08	0.9683507D-08
ISDGMR: 220	0.1063382D-09	0.1063382D-09	ISDGMR: 57	0.9493625D-08	0.9493625D-08
ISDGMR: 221	0.1039843D-09	0.1039843D-09	ISDGMR: 58	0.9063176D-08	0.9063176D-08
ISDGMR: 222	0.1014604D-09	0.1014604D-09	ISDGMR: 59	0.8878282D-08	0.8878282D-08
ISDGMR: 223	0.1004101D-09	0.1004101D-09	ISDGMR: 60	0.8801975D-08	0.8801975D-08
ISDGMR: 224	0.1002043D-09	0.1002043D-09	ISDGMR: 61	0.8693995D-08	0.8693995D-08
ISDGMR: 225	0.9855313D-10	0.9855313D-10	ISDGMR: 62	0.8545871D-08	0.8545871D-08

IErr= 0 Err= 9.86D-11 NSaved= 6 NIter= 225 NITot= 232.
PS= 192.00000000000000 PSN= 192.00000000000000 RNE=
192.00000000000000 Err=-1.04D-15
ItDFit: ISolve= 4 NSavIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=
1000 IStorA=2
Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.72D+03 BPNorm= 7.03D+01
Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10
Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=
744 KMP= 744

Iter	Natral	Err Est	Error Estimate
ISDGMR: 0	0.3618575D-05	0.3618575D-05	
ISDGMR: 1	0.2532937D-05	0.2532937D-05	
ISDGMR: 2	0.1101581D-05	0.1101581D-05	
ISDGMR: 3	0.6185638D-06	0.6185638D-06	
ISDGMR: 4	0.5251442D-06	0.5251442D-06	
ISDGMR: 5	0.4991112D-06	0.4991112D-06	
ISDGMR: 6	0.4688162D-06	0.4688162D-06	
ISDGMR: 7	0.4433628D-06	0.4433628D-06	
ISDGMR: 8	0.3746218D-06	0.3746218D-06	
ISDGMR: 9	0.3366988D-06	0.3366988D-06	
ISDGMR: 10	0.2980809D-06	0.2980809D-06	
ISDGMR: 11	0.2444737D-06	0.2444737D-06	
ISDGMR: 12	0.1973395D-06	0.1973395D-06	
ISDGMR: 13	0.1441725D-06	0.1441725D-06	
ISDGMR: 14	0.1226049D-06	0.1226049D-06	
ISDGMR: 15	0.1015472D-06	0.1015472D-06	
ISDGMR: 16	0.8695049D-07	0.8695049D-07	
ISDGMR: 17	0.7639547D-07	0.7639547D-07	
ISDGMR: 18	0.6565970D-07	0.6565970D-07	
ISDGMR: 19	0.5826427D-07	0.5826427D-07	
ISDGMR: 20	0.5474407D-07	0.5474407D-07	
ISDGMR: 21	0.5092864D-07	0.5092864D-07	
ISDGMR: 22	0.4814569D-07	0.4814569D-07	
ISDGMR: 23	0.4303106D-07	0.4303106D-07	
ISDGMR: 24	0.4070423D-07	0.4070423D-07	
ISDGMR: 25	0.3906117D-07	0.3906117D-07	
ISDGMR: 26	0.3702849D-07	0.3702849D-07	
ISDGMR: 27	0.3204415D-07	0.3204415D-07	
ISDGMR: 28	0.2902692D-07	0.2902692D-07	
ISDGMR: 29	0.2732408D-07	0.2732408D-07	
ISDGMR: 30	0.2561804D-07	0.2561804D-07	
ISDGMR: 31	0.2500873D-07	0.2500873D-07	
ISDGMR: 32	0.2373685D-07	0.2373685D-07	
ISDGMR: 33	0.2240895D-07	0.2240895D-07	
ISDGMR: 34	0.2113516D-07	0.2113516D-07	
ISDGMR: 35	0.1961428D-07	0.1961428D-07	
ISDGMR: 36	0.1835151D-07	0.1835151D-07	
ISDGMR: 37	0.1762123D-07	0.1762123D-07	
ISDGMR: 38	0.1713815D-07	0.1713815D-07	
ISDGMR: 39	0.1666372D-07	0.1666372D-07	
ISDGMR: 40	0.1617963D-07	0.1617963D-07	
ISDGMR: 41	0.1574441D-07	0.1574441D-07	
ISDGMR: 42	0.1506859D-07	0.1506859D-07	
ISDGMR: 43	0.1444664D-07	0.1444664D-07	
ISDGMR: 44	0.1403273D-07	0.1403273D-07	
ISDGMR: 45	0.1345189D-07	0.1345189D-07	
ISDGMR: 46	0.1253828D-07	0.1253828D-07	
ISDGMR: 47	0.1205894D-07	0.1205894D-07	
ISDGMR: 48	0.1165091D-07	0.1165091D-07	
ISDGMR: 49	0.1145347D-07	0.1145347D-07	
ISDGMR: 50	0.1107103D-07	0.1107103D-07	
ISDGMR: 51	0.1074126D-07	0.1074126D-07	
ISDGMR: 52	0.1029335D-07	0.1029335D-07	
ISDGMR: 53	0.1003959D-07	0.1003959D-07	
ISDGMR: 54	0.9914990D-08	0.9914990D-08	
ISDGMR: 55	0.9822792D-08	0.9822792D-08	
ISDGMR: 56	0.9683507D-08	0.9683507D-08	
ISDGMR: 57	0.9493625D-08	0.9493625D-08	
ISDGMR: 58	0.9063176D-08	0.9063176D-08	
ISDGMR: 59	0.8878282D-08	0.8878282D-08	
ISDGMR: 60	0.8801975D-08	0.8801975D-08	
ISDGMR: 61	0.8693995D-08	0.8693995D-08	
ISDGMR: 62	0.8545871D-08	0.8545871D-08	
ISDGMR: 63	0.8435600D-08	0.8435600D-08	
ISDGMR: 64	0.8358153D-08	0.8358153D-08	
ISDGMR: 65	0.8270567D-08	0.8270567D-08	
ISDGMR: 66	0.8093951D-08	0.8093951D-08	
ISDGMR: 67	0.7976823D-08	0.7976823D-08	
ISDGMR: 68	0.7872656D-08	0.7872656D-08	
ISDGMR: 69	0.7748559D-08	0.7748559D-08	
ISDGMR: 70	0.7587046D-08	0.7587046D-08	
ISDGMR: 71	0.7399863D-08	0.7399863D-08	
ISDGMR: 72	0.7274353D-08	0.7274353D-08	
ISDGMR: 73	0.7236952D-08	0.7236952D-08	
ISDGMR: 74	0.7198938D-08	0.7198938D-08	
ISDGMR: 75	0.7023024D-08	0.7023024D-08	
ISDGMR: 76	0.6832122D-08	0.6832122D-08	
ISDGMR: 77	0.6734487D-08	0.6734487D-08	
ISDGMR: 78	0.6692723D-08	0.6692723D-08	
ISDGMR: 79	0.6353169D-08	0.6353169D-08	
ISDGMR: 80	0.6192440D-08	0.6192440D-08	
ISDGMR: 81	0.6037238D-08	0.6037238D-08	
ISDGMR: 82	0.6025168D-08	0.6025168D-08	
ISDGMR: 83	0.5712409D-08	0.5712409D-08	
ISDGMR: 84	0.5424283D-08	0.5424283D-08	
ISDGMR: 85	0.5193255D-08	0.5193255D-08	
ISDGMR: 86	0.5116188D-08	0.5116188D-08	
ISDGMR: 87	0.4736564D-08	0.4736564D-08	
ISDGMR: 88	0.4436532D-08	0.4436532D-08	
ISDGMR: 89	0.4260646D-08	0.4260646D-08	
ISDGMR: 90	0.4047621D-08	0.4047621D-08	
ISDGMR: 91	0.3658167D-08	0.3658167D-08	
ISDGMR: 92	0.3381366D-08	0.3381366D-08	

ISDGMR: 93 0.3337406D-08 0.3337406D-08
 ISDGMR: 94 0.3274490D-08 0.3274490D-08
 ISDGMR: 95 0.3241197D-08 0.3241197D-08
 ISDGMR: 96 0.3198563D-08 0.3198563D-08
 ISDGMR: 97 0.3043080D-08 0.3043080D-08
 ISDGMR: 98 0.2986788D-08 0.2986788D-08
 ISDGMR: 99 0.2944926D-08 0.2944926D-08
 ISDGMR: 100 0.2799825D-08 0.2799825D-08
 ISDGMR: 101 0.2741212D-08 0.2741212D-08
 ISDGMR: 102 0.2691555D-08 0.2691555D-08
 ISDGMR: 103 0.2556250D-08 0.2556250D-08
 ISDGMR: 104 0.2339575D-08 0.2339575D-08
 ISDGMR: 105 0.2214131D-08 0.2214131D-08
 ISDGMR: 106 0.2137701D-08 0.2137701D-08
 ISDGMR: 107 0.2040790D-08 0.2040790D-08
 ISDGMR: 108 0.1957241D-08 0.1957241D-08
 ISDGMR: 109 0.1849556D-08 0.1849556D-08
 ISDGMR: 110 0.1695994D-08 0.1695994D-08
 ISDGMR: 111 0.1631300D-08 0.1631300D-08
 ISDGMR: 112 0.1582397D-08 0.1582397D-08
 ISDGMR: 113 0.1487213D-08 0.1487213D-08
 ISDGMR: 114 0.1412933D-08 0.1412933D-08
 ISDGMR: 115 0.1360481D-08 0.1360481D-08
 ISDGMR: 116 0.1291986D-08 0.1291986D-08
 ISDGMR: 117 0.1262254D-08 0.1262254D-08
 ISDGMR: 118 0.1203717D-08 0.1203717D-08
 ISDGMR: 119 0.1180502D-08 0.1180502D-08
 ISDGMR: 120 0.1157625D-08 0.1157625D-08
 ISDGMR: 121 0.1115055D-08 0.1115055D-08
 ISDGMR: 122 0.1075129D-08 0.1075129D-08
 ISDGMR: 123 0.1044271D-08 0.1044271D-08
 ISDGMR: 124 0.9890850D-09 0.9890850D-09
 ISDGMR: 125 0.9401385D-09 0.9401385D-09
 ISDGMR: 126 0.9210851D-09 0.9210851D-09
 ISDGMR: 127 0.9015537D-09 0.9015537D-09
 ISDGMR: 128 0.8596917D-09 0.8596917D-09
 ISDGMR: 129 0.8368548D-09 0.8368548D-09
 ISDGMR: 130 0.8118641D-09 0.8118641D-09
 ISDGMR: 131 0.7919371D-09 0.7919371D-09
 ISDGMR: 132 0.7771224D-09 0.7771224D-09
 ISDGMR: 133 0.7514165D-09 0.7514165D-09
 ISDGMR: 134 0.7407510D-09 0.7407510D-09
 ISDGMR: 135 0.7225416D-09 0.7225416D-09
 ISDGMR: 136 0.7079555D-09 0.7079555D-09
 ISDGMR: 137 0.6882945D-09 0.6882945D-09
 ISDGMR: 138 0.6745535D-09 0.6745535D-09
 ISDGMR: 139 0.6604040D-09 0.6604040D-09
 ISDGMR: 140 0.6450274D-09 0.6450274D-09
 ISDGMR: 141 0.6183330D-09 0.6183330D-09
 ISDGMR: 142 0.6104952D-09 0.6104952D-09
 ISDGMR: 143 0.5975797D-09 0.5975797D-09
 ISDGMR: 144 0.5780614D-09 0.5780614D-09
 ISDGMR: 145 0.5640710D-09 0.5640710D-09
 ISDGMR: 146 0.5619291D-09 0.5619291D-09
 ISDGMR: 147 0.5416572D-09 0.5416572D-09
 ISDGMR: 148 0.4995773D-09 0.4995773D-09
 ISDGMR: 149 0.4712360D-09 0.4712360D-09
 ISDGMR: 150 0.4623085D-09 0.4623085D-09
 ISDGMR: 151 0.4620622D-09 0.4620622D-09
 ISDGMR: 152 0.4580235D-09 0.4580235D-09
 ISDGMR: 153 0.4465960D-09 0.4465960D-09
 ISDGMR: 154 0.4427418D-09 0.4427418D-09
 ISDGMR: 155 0.4350251D-09 0.4350251D-09
 ISDGMR: 156 0.4238724D-09 0.4238724D-09
 ISDGMR: 157 0.4147048D-09 0.4147048D-09
 ISDGMR: 158 0.4069698D-09 0.4069698D-09
 ISDGMR: 159 0.4043448D-09 0.4043448D-09
 ISDGMR: 160 0.3963527D-09 0.3963527D-09
 ISDGMR: 161 0.3910576D-09 0.3910576D-09
 ISDGMR: 162 0.3735808D-09 0.3735808D-09
 ISDGMR: 163 0.3661492D-09 0.3661492D-09
 ISDGMR: 164 0.3507503D-09 0.3507503D-09
 ISDGMR: 165 0.3402288D-09 0.3402288D-09

ISDGMR: 166 0.3326437D-09 0.3326437D-09
 ISDGMR: 167 0.3229525D-09 0.3229525D-09
 ISDGMR: 168 0.3167596D-09 0.3167596D-09
 ISDGMR: 169 0.3162584D-09 0.3162584D-09
 ISDGMR: 170 0.3100233D-09 0.3100233D-09
 ISDGMR: 171 0.2887414D-09 0.2887414D-09
 ISDGMR: 172 0.2741746D-09 0.2741746D-09
 ISDGMR: 173 0.2684797D-09 0.2684797D-09
 ISDGMR: 174 0.2638444D-09 0.2638444D-09
 ISDGMR: 175 0.2617765D-09 0.2617765D-09
 ISDGMR: 176 0.2559213D-09 0.2559213D-09
 ISDGMR: 177 0.2374639D-09 0.2374639D-09
 ISDGMR: 178 0.2218783D-09 0.2218783D-09
 ISDGMR: 179 0.2148828D-09 0.2148828D-09
 ISDGMR: 180 0.2082127D-09 0.2082127D-09
 ISDGMR: 181 0.2037400D-09 0.2037400D-09
 ISDGMR: 182 0.1895737D-09 0.1895737D-09
 ISDGMR: 183 0.1775941D-09 0.1775941D-09
 ISDGMR: 184 0.1754021D-09 0.1754021D-09
 ISDGMR: 185 0.1694781D-09 0.1694781D-09
 ISDGMR: 186 0.1654982D-09 0.1654982D-09
 ISDGMR: 187 0.1637178D-09 0.1637178D-09
 ISDGMR: 188 0.1599458D-09 0.1599458D-09
 ISDGMR: 189 0.1571279D-09 0.1571279D-09
 ISDGMR: 190 0.1548145D-09 0.1548145D-09
 ISDGMR: 191 0.1512899D-09 0.1512899D-09
 ISDGMR: 192 0.1499237D-09 0.1499237D-09
 ISDGMR: 193 0.1453950D-09 0.1453950D-09
 ISDGMR: 194 0.1429555D-09 0.1429555D-09
 ISDGMR: 195 0.1411505D-09 0.1411505D-09
 ISDGMR: 196 0.1403355D-09 0.1403355D-09
 ISDGMR: 197 0.1350252D-09 0.1350252D-09
 ISDGMR: 198 0.1306800D-09 0.1306800D-09
 ISDGMR: 199 0.1227308D-09 0.1227308D-09
 ISDGMR: 200 0.1198794D-09 0.1198794D-09
 ISDGMR: 201 0.1151174D-09 0.1151174D-09
 ISDGMR: 202 0.1119458D-09 0.1119458D-09
 ISDGMR: 203 0.1068567D-09 0.1068567D-09
 ISDGMR: 204 0.1007298D-09 0.1007298D-09
 ISDGMR: 205 0.9113373D-10 0.9113373D-10

IErr= 0 Err= 9.11D-11 NSaved= 6 NIter= 205 NITot= 212.
 PS= 192.000000000000 PSN= 192.000000000000 RNE=
 192.000000000000 Err= 0.00D+00
 ItDFit: ISolve= 4 NSavIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=
 1000 IStorA=2
 Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.72D+03 BPNorm= 7.03D+01
 Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10
 Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=
 744 KMP= 744

Iter Natral Err Est Error Estimate
 ISDGMR: 0 0.9891653D-06 0.9891653D-06
 ISDGMR: 1 0.6560025D-06 0.6560025D-06
 ISDGMR: 2 0.2894791D-06 0.2894791D-06
 ISDGMR: 3 0.1688747D-06 0.1688747D-06
 ISDGMR: 4 0.1361251D-06 0.1361251D-06
 ISDGMR: 5 0.1255071D-06 0.1255071D-06
 ISDGMR: 6 0.1168121D-06 0.1168121D-06
 ISDGMR: 7 0.1108551D-06 0.1108551D-06
 ISDGMR: 8 0.1046166D-06 0.1046166D-06
 ISDGMR: 9 0.9513793D-07 0.9513793D-07
 ISDGMR: 10 0.8448481D-07 0.8448481D-07
 ISDGMR: 11 0.6591199D-07 0.6591199D-07
 ISDGMR: 12 0.5303463D-07 0.5303463D-07
 ISDGMR: 13 0.4069985D-07 0.4069985D-07
 ISDGMR: 14 0.3492649D-07 0.3492649D-07
 ISDGMR: 15 0.2969051D-07 0.2969051D-07
 ISDGMR: 16 0.2659144D-07 0.2659144D-07
 ISDGMR: 17 0.2323916D-07 0.2323916D-07
 ISDGMR: 18 0.2023039D-07 0.2023039D-07
 ISDGMR: 19 0.1710150D-07 0.1710150D-07
 ISDGMR: 20 0.1600064D-07 0.1600064D-07
 ISDGMR: 21 0.1516942D-07 0.1516942D-07
 ISDGMR: 22 0.1448508D-07 0.1448508D-07

```

ISDGMR: 23 0.1361117D-07 0.1361117D-07
ISDGMR: 24 0.1232591D-07 0.1232591D-07
ISDGMR: 25 0.1143519D-07 0.1143519D-07
ISDGMR: 26 0.1070229D-07 0.1070229D-07
ISDGMR: 27 0.9629100D-08 0.9629100D-08
ISDGMR: 28 0.8804569D-08 0.8804569D-08
ISDGMR: 29 0.7829793D-08 0.7829793D-08
ISDGMR: 30 0.7312120D-08 0.7312120D-08
ISDGMR: 31 0.7107382D-08 0.7107382D-08
ISDGMR: 32 0.6942847D-08 0.6942847D-08
ISDGMR: 33 0.6556487D-08 0.6556487D-08
ISDGMR: 34 0.6120686D-08 0.6120686D-08
ISDGMR: 35 0.5536205D-08 0.5536205D-08
ISDGMR: 36 0.5088551D-08 0.5088551D-08
ISDGMR: 37 0.4800565D-08 0.4800565D-08
ISDGMR: 38 0.4569407D-08 0.4569407D-08
ISDGMR: 39 0.4458761D-08 0.4458761D-08
ISDGMR: 40 0.4299076D-08 0.4299076D-08
ISDGMR: 41 0.4106630D-08 0.4106630D-08
ISDGMR: 42 0.3853200D-08 0.3853200D-08
ISDGMR: 43 0.3663124D-08 0.3663124D-08
ISDGMR: 44 0.3528781D-08 0.3528781D-08
ISDGMR: 45 0.3278167D-08 0.3278167D-08
ISDGMR: 46 0.3152422D-08 0.3152422D-08
ISDGMR: 47 0.2996679D-08 0.2996679D-08
ISDGMR: 48 0.2805524D-08 0.2805524D-08
ISDGMR: 49 0.2707920D-08 0.2707920D-08
ISDGMR: 50 0.2649430D-08 0.2649430D-08
ISDGMR: 51 0.2562365D-08 0.2562365D-08
ISDGMR: 52 0.2393492D-08 0.2393492D-08
ISDGMR: 53 0.2314727D-08 0.2314727D-08
ISDGMR: 54 0.2285401D-08 0.2285401D-08
ISDGMR: 55 0.2190836D-08 0.2190836D-08
ISDGMR: 56 0.2109139D-08 0.2109139D-08
ISDGMR: 57 0.2066087D-08 0.2066087D-08
ISDGMR: 58 0.1991625D-08 0.1991625D-08
ISDGMR: 59 0.1943649D-08 0.1943649D-08
ISDGMR: 60 0.1786437D-08 0.1786437D-08
ISDGMR: 61 0.1751568D-08 0.1751568D-08
ISDGMR: 62 0.1719750D-08 0.1719750D-08
ISDGMR: 63 0.1672054D-08 0.1672054D-08
ISDGMR: 64 0.1660871D-08 0.1660871D-08
ISDGMR: 65 0.1641623D-08 0.1641623D-08
ISDGMR: 66 0.1619042D-08 0.1619042D-08
ISDGMR: 67 0.1611138D-08 0.1611138D-08
ISDGMR: 68 0.1588727D-08 0.1588727D-08
ISDGMR: 69 0.1561565D-08 0.1561565D-08
ISDGMR: 70 0.1535617D-08 0.1535617D-08
ISDGMR: 71 0.1496847D-08 0.1496847D-08
ISDGMR: 72 0.1488071D-08 0.1488071D-08
ISDGMR: 73 0.1476816D-08 0.1476816D-08
ISDGMR: 74 0.1476809D-08 0.1476809D-08
ISDGMR: 75 0.1447349D-08 0.1447349D-08
ISDGMR: 76 0.1415594D-08 0.1415594D-08
ISDGMR: 77 0.1383311D-08 0.1383311D-08
ISDGMR: 78 0.1379516D-08 0.1379516D-08
ISDGMR: 79 0.1337045D-08 0.1337045D-08
ISDGMR: 80 0.1311333D-08 0.1311333D-08
ISDGMR: 81 0.1301984D-08 0.1301984D-08
ISDGMR: 82 0.1261813D-08 0.1261813D-08
ISDGMR: 83 0.1218511D-08 0.1218511D-08
ISDGMR: 84 0.1187718D-08 0.1187718D-08
ISDGMR: 85 0.1146352D-08 0.1146352D-08
ISDGMR: 86 0.1107884D-08 0.1107884D-08
ISDGMR: 87 0.1068764D-08 0.1068764D-08
ISDGMR: 88 0.1013584D-08 0.1013584D-08
ISDGMR: 89 0.9361723D-09 0.9361723D-09
ISDGMR: 90 0.8358864D-09 0.8358864D-09
ISDGMR: 91 0.7656016D-09 0.7656016D-09
ISDGMR: 92 0.7280154D-09 0.7280154D-09
ISDGMR: 93 0.7151149D-09 0.7151149D-09
ISDGMR: 94 0.6865179D-09 0.6865179D-09
ISDGMR: 95 0.6353626D-09 0.6353626D-09
ISDGMR: 96 0.5963658D-09 0.5963658D-09
ISDGMR: 97 0.5826377D-09 0.5826377D-09
ISDGMR: 98 0.5660905D-09 0.5660905D-09
ISDGMR: 99 0.5526615D-09 0.5526615D-09
ISDGMR: 100 0.5334369D-09 0.5334369D-09
ISDGMR: 101 0.5105389D-09 0.5105389D-09
ISDGMR: 102 0.4954327D-09 0.4954327D-09
ISDGMR: 103 0.4800105D-09 0.4800105D-09
ISDGMR: 104 0.4670728D-09 0.4670728D-09
ISDGMR: 105 0.4521002D-09 0.4521002D-09
ISDGMR: 106 0.4350270D-09 0.4350270D-09
ISDGMR: 107 0.4221505D-09 0.4221505D-09
ISDGMR: 108 0.4069729D-09 0.4069729D-09
ISDGMR: 109 0.3941874D-09 0.3941874D-09
ISDGMR: 110 0.3770783D-09 0.3770783D-09
ISDGMR: 111 0.3673680D-09 0.3673680D-09
ISDGMR: 112 0.3534950D-09 0.3534950D-09
ISDGMR: 113 0.3426018D-09 0.3426018D-09
ISDGMR: 114 0.3267945D-09 0.3267945D-09
ISDGMR: 115 0.3029841D-09 0.3029841D-09
ISDGMR: 116 0.2860608D-09 0.2860608D-09
ISDGMR: 117 0.2797815D-09 0.2797815D-09
ISDGMR: 118 0.2727802D-09 0.2727802D-09
ISDGMR: 119 0.2701641D-09 0.2701641D-09
ISDGMR: 120 0.2588080D-09 0.2588080D-09
ISDGMR: 121 0.2525058D-09 0.2525058D-09
ISDGMR: 122 0.2435891D-09 0.2435891D-09
ISDGMR: 123 0.2250155D-09 0.2250155D-09
ISDGMR: 124 0.2234888D-09 0.2234888D-09
ISDGMR: 125 0.2229346D-09 0.2229346D-09
ISDGMR: 126 0.2142221D-09 0.2142221D-09
ISDGMR: 127 0.2104834D-09 0.2104834D-09
ISDGMR: 128 0.2086039D-09 0.2086039D-09
ISDGMR: 129 0.2038759D-09 0.2038759D-09
ISDGMR: 130 0.1981908D-09 0.1981908D-09
ISDGMR: 131 0.1957043D-09 0.1957043D-09
ISDGMR: 132 0.1940917D-09 0.1940917D-09
ISDGMR: 133 0.1923070D-09 0.1923070D-09
ISDGMR: 134 0.1864557D-09 0.1864557D-09
ISDGMR: 135 0.1784771D-09 0.1784771D-09
ISDGMR: 136 0.1723027D-09 0.1723027D-09
ISDGMR: 137 0.1672685D-09 0.1672685D-09
ISDGMR: 138 0.1631992D-09 0.1631992D-09
ISDGMR: 139 0.1588139D-09 0.1588139D-09
ISDGMR: 140 0.1530784D-09 0.1530784D-09
ISDGMR: 141 0.1507330D-09 0.1507330D-09
ISDGMR: 142 0.1493649D-09 0.1493649D-09
ISDGMR: 143 0.1471170D-09 0.1471170D-09
ISDGMR: 144 0.1434282D-09 0.1434282D-09
ISDGMR: 145 0.1366872D-09 0.1366872D-09
ISDGMR: 146 0.1315781D-09 0.1315781D-09
ISDGMR: 147 0.1266406D-09 0.1266406D-09
ISDGMR: 148 0.1208720D-09 0.1208720D-09
ISDGMR: 149 0.1153980D-09 0.1153980D-09
ISDGMR: 150 0.1104530D-09 0.1104530D-09
ISDGMR: 151 0.1064820D-09 0.1064820D-09
ISDGMR: 152 0.1037294D-09 0.1037294D-09
ISDGMR: 153 0.9638494D-10 0.9638494D-10
IErr= 0 Err= 9.64D-11 NSaved= 6 NIter= 153 NITot= 160.
PS= 192.0000000000001 PSN= 192.0000000000000 RNE=
192.0000000000000 Err= 4.44D-16
ItDFit: ISolve= 4 NSavIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=
1000 IStorA=2
Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.72D+03 BPNorm= 7.03D+01
Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10
Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=
744 KMP= 744
Iter Natral Err Est Error Estimate
ISDGMR: 0 0.4642970D-06 0.4642970D-06
ISDGMR: 1 0.3159482D-06 0.3159482D-06
ISDGMR: 2 0.1469308D-06 0.1469308D-06
ISDGMR: 3 0.6687881D-07 0.6687881D-07
ISDGMR: 4 0.5320588D-07 0.5320588D-07

```

ISDGMR: 5 0.4603198D-07 0.4603198D-07
 ISDGMR: 6 0.42944460D-07 0.42944460D-07
 ISDGMR: 7 0.3968416D-07 0.3968416D-07
 ISDGMR: 8 0.3451824D-07 0.3451824D-07
 ISDGMR: 9 0.3070681D-07 0.3070681D-07
 ISDGMR: 10 0.2655933D-07 0.2655933D-07
 ISDGMR: 11 0.2366694D-07 0.2366694D-07
 ISDGMR: 12 0.2016726D-07 0.2016726D-07
 ISDGMR: 13 0.1770044D-07 0.1770044D-07
 ISDGMR: 14 0.1416445D-07 0.1416445D-07
 ISDGMR: 15 0.1272963D-07 0.1272963D-07
 ISDGMR: 16 0.1026423D-07 0.1026423D-07
 ISDGMR: 17 0.9180158D-08 0.9180158D-08
 ISDGMR: 18 0.7162759D-08 0.7162759D-08
 ISDGMR: 19 0.6377530D-08 0.6377530D-08
 ISDGMR: 20 0.5901547D-08 0.5901547D-08
 ISDGMR: 21 0.5611934D-08 0.5611934D-08
 ISDGMR: 22 0.5265408D-08 0.5265408D-08
 ISDGMR: 23 0.4697028D-08 0.4697028D-08
 ISDGMR: 24 0.4440176D-08 0.4440176D-08
 ISDGMR: 25 0.4096984D-08 0.4096984D-08
 ISDGMR: 26 0.3843146D-08 0.3843146D-08
 ISDGMR: 27 0.3569666D-08 0.3569666D-08
 ISDGMR: 28 0.3267049D-08 0.3267049D-08
 ISDGMR: 29 0.2788679D-08 0.2788679D-08
 ISDGMR: 30 0.2585696D-08 0.2585696D-08
 ISDGMR: 31 0.2442939D-08 0.2442939D-08
 ISDGMR: 32 0.2387246D-08 0.2387246D-08
 ISDGMR: 33 0.2368661D-08 0.2368661D-08
 ISDGMR: 34 0.2306402D-08 0.2306402D-08
 ISDGMR: 35 0.2159156D-08 0.2159156D-08
 ISDGMR: 36 0.2027875D-08 0.2027875D-08
 ISDGMR: 37 0.1972876D-08 0.1972876D-08
 ISDGMR: 38 0.1920853D-08 0.1920853D-08
 ISDGMR: 39 0.1877502D-08 0.1877502D-08
 ISDGMR: 40 0.1815515D-08 0.1815515D-08
 ISDGMR: 41 0.1760668D-08 0.1760668D-08
 ISDGMR: 42 0.1684278D-08 0.1684278D-08
 ISDGMR: 43 0.1661777D-08 0.1661777D-08
 ISDGMR: 44 0.1639541D-08 0.1639541D-08
 ISDGMR: 45 0.1600683D-08 0.1600683D-08
 ISDGMR: 46 0.1551169D-08 0.1551169D-08
 ISDGMR: 47 0.1468737D-08 0.1468737D-08
 ISDGMR: 48 0.1448501D-08 0.1448501D-08
 ISDGMR: 49 0.1433266D-08 0.1433266D-08
 ISDGMR: 50 0.1396807D-08 0.1396807D-08
 ISDGMR: 51 0.1357838D-08 0.1357838D-08
 ISDGMR: 52 0.1317492D-08 0.1317492D-08
 ISDGMR: 53 0.1286089D-08 0.1286089D-08
 ISDGMR: 54 0.1276814D-08 0.1276814D-08
 ISDGMR: 55 0.1276432D-08 0.1276432D-08
 ISDGMR: 56 0.1258772D-08 0.1258772D-08
 ISDGMR: 57 0.1222251D-08 0.1222251D-08
 ISDGMR: 58 0.1166402D-08 0.1166402D-08
 ISDGMR: 59 0.1139412D-08 0.1139412D-08
 ISDGMR: 60 0.1138273D-08 0.1138273D-08
 ISDGMR: 61 0.1132684D-08 0.1132684D-08
 ISDGMR: 62 0.1113453D-08 0.1113453D-08
 ISDGMR: 63 0.1103505D-08 0.1103505D-08
 ISDGMR: 64 0.1092754D-08 0.1092754D-08
 ISDGMR: 65 0.1077238D-08 0.1077238D-08
 ISDGMR: 66 0.1067347D-08 0.1067347D-08
 ISDGMR: 67 0.1050375D-08 0.1050375D-08
 ISDGMR: 68 0.1044971D-08 0.1044971D-08
 ISDGMR: 69 0.1031329D-08 0.1031329D-08
 ISDGMR: 70 0.1021043D-08 0.1021043D-08
 ISDGMR: 71 0.9960804D-09 0.9960804D-09
 ISDGMR: 72 0.9409530D-09 0.9409530D-09
 ISDGMR: 73 0.9294179D-09 0.9294179D-09
 ISDGMR: 74 0.9035823D-09 0.9035823D-09
 ISDGMR: 75 0.8997656D-09 0.8997656D-09
 ISDGMR: 76 0.8407387D-09 0.8407387D-09
 ISDGMR: 77 0.8266159D-09 0.8266159D-09

ISDGMR: 78 0.8172283D-09 0.8172283D-09
 ISDGMR: 79 0.7955459D-09 0.7955459D-09
 ISDGMR: 80 0.7542139D-09 0.7542139D-09
 ISDGMR: 81 0.7449850D-09 0.7449850D-09
 ISDGMR: 82 0.7258345D-09 0.7258345D-09
 ISDGMR: 83 0.6874970D-09 0.6874970D-09
 ISDGMR: 84 0.6587275D-09 0.6587275D-09
 ISDGMR: 85 0.6474467D-09 0.6474467D-09
 ISDGMR: 86 0.6161583D-09 0.6161583D-09
 ISDGMR: 87 0.5825030D-09 0.5825030D-09
 ISDGMR: 88 0.5463690D-09 0.5463690D-09
 ISDGMR: 89 0.5146352D-09 0.5146352D-09
 ISDGMR: 90 0.4962418D-09 0.4962418D-09
 ISDGMR: 91 0.4725673D-09 0.4725673D-09
 ISDGMR: 92 0.4362411D-09 0.4362411D-09
 ISDGMR: 93 0.4194033D-09 0.4194033D-09
 ISDGMR: 94 0.4111371D-09 0.4111371D-09
 ISDGMR: 95 0.3997733D-09 0.3997733D-09
 ISDGMR: 96 0.3925936D-09 0.3925936D-09
 ISDGMR: 97 0.3870305D-09 0.3870305D-09
 ISDGMR: 98 0.3729796D-09 0.3729796D-09
 ISDGMR: 99 0.3449904D-09 0.3449904D-09
 ISDGMR: 100 0.3211795D-09 0.3211795D-09
 ISDGMR: 101 0.3143293D-09 0.3143293D-09
 ISDGMR: 102 0.3131065D-09 0.3131065D-09
 ISDGMR: 103 0.3071017D-09 0.3071017D-09
 ISDGMR: 104 0.3002458D-09 0.3002458D-09
 ISDGMR: 105 0.2894374D-09 0.2894374D-09
 ISDGMR: 106 0.2606791D-09 0.2606791D-09
 ISDGMR: 107 0.2490582D-09 0.2490582D-09
 ISDGMR: 108 0.2401789D-09 0.2401789D-09
 ISDGMR: 109 0.2211313D-09 0.2211313D-09
 ISDGMR: 110 0.2102155D-09 0.2102155D-09
 ISDGMR: 111 0.2068216D-09 0.2068216D-09
 ISDGMR: 112 0.1970859D-09 0.1970859D-09
 ISDGMR: 113 0.1847675D-09 0.1847675D-09
 ISDGMR: 114 0.1761596D-09 0.1761596D-09
 ISDGMR: 115 0.1669976D-09 0.1669976D-09
 ISDGMR: 116 0.1600502D-09 0.1600502D-09
 ISDGMR: 117 0.1560312D-09 0.1560312D-09
 ISDGMR: 118 0.1479050D-09 0.1479050D-09
 ISDGMR: 119 0.1442442D-09 0.1442442D-09
 ISDGMR: 120 0.1391241D-09 0.1391241D-09
 ISDGMR: 121 0.1343044D-09 0.1343044D-09
 ISDGMR: 122 0.1306385D-09 0.1306385D-09
 ISDGMR: 123 0.1244461D-09 0.1244461D-09
 ISDGMR: 124 0.1197501D-09 0.1197501D-09
 ISDGMR: 125 0.1143805D-09 0.1143805D-09
 ISDGMR: 126 0.1107945D-09 0.1107945D-09
 ISDGMR: 127 0.1088576D-09 0.1088576D-09
 ISDGMR: 128 0.1068133D-09 0.1068133D-09
 ISDGMR: 129 0.1005870D-09 0.1005870D-09
 ISDGMR: 130 0.9660175D-10 0.9660175D-10
 Err= 0 Err= 9.66D-11 NSaved= 6 NIter= 130 NITot= 137.
 PS= 192.000000000000 PSN= 192.000000000000 RNE=
 192.000000000000 Err=-1.48D-16
 ItDFit: ISolve= 4 NSAvIt= 745 ITol= 0 Tol= 1.00D-10 ItMax=
 1000 IStorA=2
 Conv0= 2.73D-09 BNorm= 4.72D+03 BPNorm= 7.03D+01
 Conv= 1.00D-10 AccInt= 1.00D-10
 Generalized Minimum Residual for N= 744 ITol= 0 MaxL=
 744 KMP= 744
 Iter Natral Err Est Error Estimate
 ISDGMR: 0 0.3173192D-06 0.3173192D-06
 ISDGMR: 1 0.2188109D-06 0.2188109D-06
 ISDGMR: 2 0.1012135D-06 0.1012135D-06
 ISDGMR: 3 0.5117221D-07 0.5117221D-07
 ISDGMR: 4 0.3625441D-07 0.3625441D-07
 ISDGMR: 5 0.2893944D-07 0.2893944D-07
 ISDGMR: 6 0.2641792D-07 0.2641792D-07
 ISDGMR: 7 0.2460956D-07 0.2460956D-07
 ISDGMR: 8 0.2185346D-07 0.2185346D-07
 ISDGMR: 9 0.1926025D-07 0.1926025D-07

```

ISDGMR: 10 0.1699071D-07 0.1699071D-07
ISDGMR: 11 0.1464316D-07 0.1464316D-07
ISDGMR: 12 0.1247109D-07 0.1247109D-07
ISDGMR: 13 0.1053630D-07 0.1053630D-07
ISDGMR: 14 0.8170788D-08 0.8170788D-08
ISDGMR: 15 0.7079229D-08 0.7079229D-08
ISDGMR: 16 0.6098712D-08 0.6098712D-08
ISDGMR: 17 0.5420785D-08 0.5420785D-08
ISDGMR: 18 0.4615380D-08 0.4615380D-08
ISDGMR: 19 0.3814780D-08 0.3814780D-08
ISDGMR: 20 0.3513288D-08 0.3513288D-08
ISDGMR: 21 0.3322539D-08 0.3322539D-08
ISDGMR: 22 0.3221750D-08 0.3221750D-08
ISDGMR: 23 0.2971145D-08 0.2971145D-08
ISDGMR: 24 0.2730600D-08 0.2730600D-08
ISDGMR: 25 0.2568078D-08 0.2568078D-08
ISDGMR: 26 0.2252998D-08 0.2252998D-08
ISDGMR: 27 0.2025615D-08 0.2025615D-08
ISDGMR: 28 0.1933370D-08 0.1933370D-08
ISDGMR: 29 0.1706264D-08 0.1706264D-08
ISDGMR: 30 0.1519878D-08 0.1519878D-08
ISDGMR: 31 0.1390634D-08 0.1390634D-08
ISDGMR: 32 0.1356045D-08 0.1356045D-08
ISDGMR: 33 0.1349964D-08 0.1349964D-08
ISDGMR: 34 0.1342577D-08 0.1342577D-08
ISDGMR: 35 0.1305690D-08 0.1305690D-08
ISDGMR: 36 0.1197208D-08 0.1197208D-08
ISDGMR: 37 0.1160942D-08 0.1160942D-08
ISDGMR: 38 0.1146943D-08 0.1146943D-08
ISDGMR: 39 0.1138084D-08 0.1138084D-08
ISDGMR: 40 0.1125038D-08 0.1125038D-08
ISDGMR: 41 0.1117533D-08 0.1117533D-08
ISDGMR: 42 0.1104151D-08 0.1104151D-08
ISDGMR: 43 0.1059003D-08 0.1059003D-08
ISDGMR: 44 0.1052022D-08 0.1052022D-08
ISDGMR: 45 0.1051409D-08 0.1051409D-08
ISDGMR: 46 0.1030672D-08 0.1030672D-08
ISDGMR: 47 0.1024795D-08 0.1024795D-08
ISDGMR: 48 0.1019560D-08 0.1019560D-08
ISDGMR: 49 0.1001272D-08 0.1001272D-08
ISDGMR: 50 0.9929536D-09 0.9929536D-09
ISDGMR: 51 0.9917880D-09 0.9917880D-09
ISDGMR: 52 0.9855978D-09 0.9855978D-09
ISDGMR: 53 0.9588824D-09 0.9588824D-09
ISDGMR: 54 0.9427471D-09 0.9427471D-09
ISDGMR: 55 0.9418771D-09 0.9418771D-09
ISDGMR: 56 0.9385662D-09 0.9385662D-09
ISDGMR: 57 0.9299235D-09 0.9299235D-09
ISDGMR: 58 0.8978155D-09 0.8978155D-09
ISDGMR: 59 0.8529948D-09 0.8529948D-09
ISDGMR: 60 0.8523085D-09 0.8523085D-09
ISDGMR: 61 0.8457606D-09 0.8457606D-09
ISDGMR: 62 0.8369631D-09 0.8369631D-09
ISDGMR: 63 0.8304292D-09 0.8304292D-09
ISDGMR: 64 0.8108065D-09 0.8108065D-09
ISDGMR: 65 0.7941606D-09 0.7941606D-09
ISDGMR: 66 0.7722182D-09 0.7722182D-09
ISDGMR: 67 0.7246328D-09 0.7246328D-09
ISDGMR: 68 0.7242782D-09 0.7242782D-09
ISDGMR: 69 0.7082152D-09 0.7082152D-09
ISDGMR: 70 0.6789189D-09 0.6789189D-09
ISDGMR: 71 0.6450477D-09 0.6450477D-09
ISDGMR: 72 0.6148405D-09 0.6148405D-09
ISDGMR: 73 0.5720460D-09 0.5720460D-09
ISDGMR: 74 0.5382142D-09 0.5382142D-09
ISDGMR: 75 0.5236767D-09 0.5236767D-09
ISDGMR: 76 0.4983668D-09 0.4983668D-09
ISDGMR: 77 0.4778634D-09 0.4778634D-09
ISDGMR: 78 0.4623788D-09 0.4623788D-09
ISDGMR: 79 0.4456338D-09 0.4456338D-09
ISDGMR: 80 0.4223876D-09 0.4223876D-09
ISDGMR: 81 0.4070384D-09 0.4070384D-09
ISDGMR: 82 0.3905056D-09 0.3905056D-09
ISDGMR: 83 0.3734909D-09 0.3734909D-09
ISDGMR: 84 0.3471530D-09 0.3471530D-09
ISDGMR: 85 0.3364576D-09 0.3364576D-09
ISDGMR: 86 0.3297346D-09 0.3297346D-09
ISDGMR: 87 0.3139852D-09 0.3139852D-09
ISDGMR: 88 0.2854780D-09 0.2854780D-09
ISDGMR: 89 0.2693160D-09 0.2693160D-09
ISDGMR: 90 0.2521428D-09 0.2521428D-09
ISDGMR: 91 0.2304757D-09 0.2304757D-09
ISDGMR: 92 0.2175122D-09 0.2175122D-09
ISDGMR: 93 0.2102690D-09 0.2102690D-09
ISDGMR: 94 0.2032554D-09 0.2032554D-09
ISDGMR: 95 0.2015675D-09 0.2015675D-09
ISDGMR: 96 0.1989381D-09 0.1989381D-09
ISDGMR: 97 0.1882331D-09 0.1882331D-09
ISDGMR: 98 0.1767713D-09 0.1767713D-09
ISDGMR: 99 0.1720760D-09 0.1720760D-09
ISDGMR: 100 0.1674584D-09 0.1674584D-09
ISDGMR: 101 0.1593925D-09 0.1593925D-09
ISDGMR: 102 0.1532355D-09 0.1532355D-09
ISDGMR: 103 0.1484485D-09 0.1484485D-09
ISDGMR: 104 0.1422783D-09 0.1422783D-09
ISDGMR: 105 0.1352508D-09 0.1352508D-09
ISDGMR: 106 0.1334898D-09 0.1334898D-09
ISDGMR: 107 0.1307967D-09 0.1307967D-09
ISDGMR: 108 0.1261676D-09 0.1261676D-09
ISDGMR: 109 0.1225500D-09 0.1225500D-09
ISDGMR: 110 0.1189831D-09 0.1189831D-09
ISDGMR: 111 0.1155031D-09 0.1155031D-09
ISDGMR: 112 0.1105434D-09 0.1105434D-09
ISDGMR: 113 0.1083933D-09 0.1083933D-09
ISDGMR: 114 0.1055304D-09 0.1055304D-09
ISDGMR: 115 0.1020683D-09 0.1020683D-09
ISDGMR: 116 0.1008608D-09 0.1008608D-09
ISDGMR: 117 0.9898270D-10 0.9898270D-10
IErr= 0 Err= 9.90D-11 NSaved= 5 NIter= 117 NITot= 123.
PS= 192.00000000000000 PSN= 192.00000000000000 RNE=
192.00000000000000 Err=-2.96D-16
SCF Done: E(RPBE-PBE) = -1648.08233478 A.U. after 15
cycles
Conv = 0.2809D-07 -V/T = 1.9913

*****
*****
Population analysis using the SCF density.

*****
*****
Condensed to atoms (all electrons):
  1  2  3  4  5  6
  1 H  0.990807  0.105364 -0.229294  0.146876  0.041930 -
0.019924
  2 H  0.105364  0.634479 -0.150017  0.022851  0.075936 -
0.013415
  3 C -0.229294 -0.150017  9.288404 -0.055086  0.046658 -
0.023234
  4 H  0.146876  0.022851 -0.055086  0.768535  0.107147 -
0.214752
  5 H  0.041930  0.075936  0.046658  0.107147  0.762778 -
0.172131
  6 C -0.019924 -0.013415 -0.023234 -0.214752 -0.172131
9.002319
  7 C  0.063563  0.049776 -0.981443 -0.008972  0.010628 -
0.702595
  8 C -0.015912 -0.031565 -0.696744  0.009392  0.002591 -
0.072234
  9 F -0.001068 -0.002962 -0.042614 -0.000843 -0.010553 -
0.015283

```

10 F -0.003698 -0.000595 -0.036121 -0.003814 0.000162 -0.033502	10 F 0.203568 -0.091132 -0.010151 9.510338 0.000359 -0.141220
11 F -0.001439 -0.011942 -0.023340 -0.001115 -0.005715 0.000325	11 F -0.065045 0.080345 -0.142879 0.000359 9.641885 -0.009856
12 F -0.006378 0.000429 -0.018028 -0.006236 -0.000531 0.000460	12 F -0.084400 0.277353 0.000340 -0.141220 -0.009856 9.473790
13 H 0.008218 0.001530 -0.000285 0.000111 0.000016 -0.010764	13 H 0.000150 0.002482 0.000000 -0.000001 -0.000013 -0.000030
14 H 0.008218 0.000834 -0.273219 0.153594 0.028052 -0.128063	14 H 0.009908 0.013320 -0.001034 -0.005344 -0.000041 -0.000373
15 H 0.000834 0.001348 -0.000174 0.000012 0.000005 -0.010671	15 H 0.000330 0.001342 -0.000001 0.000000 0.000004 -0.000002
16 H 0.001530 0.001348 -0.218039 0.034241 0.070513 0.164654	16 H 0.003785 0.018886 -0.005572 -0.000315 -0.000239 -0.000057
17 C -0.273219 -0.218039 0.066386 -0.011002 -0.012984 0.001657	17 C -0.021284 -0.281371 0.000128 0.000161 0.031888 0.008775
18 C -0.000285 -0.000174 0.066386 -0.019959 -0.015211 0.009697	18 C -0.059808 -0.008107 -0.000547 0.001147 0.000004 0.000011
19 H 0.153594 0.034241 -0.019959 0.006093 0.001928 -0.000306	19 H 0.002193 0.050298 -0.000012 -0.000015 -0.001274 -0.003189
20 H 0.000111 0.000012 -0.011002 0.006093 0.000850 -0.230233	20 H 0.011233 0.000111 -0.000038 -0.000233 0.000000 -0.000001
21 H 0.028052 0.070513 -0.015211 0.000850 0.002510 -0.000193	21 H 0.001576 0.051339 -0.000011 -0.000002 -0.003498 -0.000480
22 H 0.000016 0.000005 -0.012984 0.001928 0.002510 -0.238015	22 H 0.024516 0.000375 -0.000401 -0.000062 -0.000001 0.000000
23 C -0.128062 0.164654 0.009697 -0.230233 -0.238015 0.066899	23 C -0.267662 -0.797906 0.010476 0.019385 -0.069589 -0.037530
24 C -0.010764 -0.010671 0.001657 -0.000306 -0.000193 0.066899	24 C -0.008014 -0.019587 0.000004 0.000009 0.000259 0.000087
25 C 0.009908 0.003785 -0.059808 0.011233 0.024516 -0.008014	25 C -0.021305 -0.738179 0.000028 -0.001462 -0.075360 -0.123902
26 C 0.000150 0.000330 -0.021284 0.002193 0.001576 -0.267662	26 C -0.021305 0.002473 -0.001969 -0.002499 0.000032 -0.000009
27 C 0.013320 0.018886 -0.008107 0.000111 0.000375 -0.019587	27 C 0.002473 -0.021424 0.000000 0.000002 0.002579 -0.003586
28 C 0.002482 0.001342 -0.281371 0.050298 0.051339 -0.797906	28 C -0.738180 -0.021424 -0.066281 -0.075512 -0.001555 -0.002794
29 F -0.001034 -0.005572 -0.000547 -0.000038 -0.000401 0.000004	29 F -0.001969 -0.066281 -0.000067 0.000000 -0.165193 0.000332
30 F 0.000000 -0.000001 0.000128 -0.000012 -0.000011 0.010476	30 F 0.000028 0.000000 -0.000067 0.000001 0.000000 0.000000
31 F -0.005344 -0.000315 0.001147 -0.000233 -0.000062 0.000009	31 F -0.002499 -0.075512 0.000001 -0.000033 -0.000075 -0.155442
32 F -0.000001 0.000000 0.000161 -0.000015 -0.000002 0.019385	32 F -0.001462 0.000002 0.000000 -0.000033 0.000000 0.000000
33 F -0.000041 -0.000239 0.000004 0.000000 -0.000001 0.000259	33 F 0.000032 -0.001555 0.000000 0.000000 -0.000047 0.000000
34 F -0.000013 0.000004 0.031888 -0.001274 -0.003498 -0.069589	34 F -0.075360 0.002579 -0.165193 -0.000075 -0.000047 0.000000
35 F -0.000373 -0.000057 0.000011 -0.000001 0.000000 0.000087	35 F -0.000009 -0.002794 0.000000 0.000000 0.000000 -0.000033
36 F -0.000030 -0.000002 0.008775 -0.003189 -0.000480 -0.037530	36 F -0.123902 -0.003586 0.000332 -0.155442 0.000000 -0.000033
7 8 9 10 11 12	13 14 15 16 17 18
1 H 0.063563 -0.015912 -0.001068 -0.003698 -0.001439 -0.006378	1 H 0.008218 0.008218 0.000834 0.001530 -0.273219 -0.000285
2 H 0.049776 -0.031565 -0.002962 -0.000595 -0.011942 0.000429	2 H 0.001530 0.000834 0.001348 0.001348 -0.218039 -0.000174
3 C -0.981443 -0.696744 -0.042614 -0.036121 -0.023340 -0.018028	3 C -0.000285 -0.273219 -0.000174 -0.218039 0.066386 0.066386
4 H -0.008972 0.009392 -0.000843 -0.003814 -0.001115 -0.006236	4 H 0.000111 0.153594 0.000012 0.034241 -0.011002 -0.019959
5 H 0.010628 0.002591 -0.010553 0.000162 -0.005715 -0.000531	5 H 0.000016 0.028052 0.000005 0.070513 -0.012984 -0.015211
6 C -0.702595 -0.072234 -0.015283 -0.033502 0.000325 0.000460	6 C -0.010764 -0.128063 -0.010671 0.164654 0.001657 0.009697
7 C 9.091996 -0.697086 0.149952 0.203568 -0.065045 -0.084400	7 C 0.000150 0.009908 0.000330 0.003785 -0.021284 -0.059808
8 C -0.697086 9.020653 -0.108543 -0.091132 0.080345 0.277353	8 C 0.002482 0.013320 0.001342 0.018886 -0.281371 -0.008107
9 F 0.149952 -0.108543 9.610243 -0.010151 -0.142879 0.000340	9 F 0.000000 -0.001034 -0.000001 -0.005572 0.000128 -0.000547

10 F -0.000001 -0.005344 0.000000 -0.000315 0.000161 0.001147	10 F -0.000015 -0.000233 -0.000002 -0.000062 0.019385 0.000009
11 F -0.000013 -0.000041 0.000004 -0.000239 0.031888 0.000004	11 F -0.001274 0.000000 -0.003498 -0.000001 -0.069589 0.000259
12 F -0.000030 -0.000373 -0.000002 -0.000057 0.008775 0.000011	12 F -0.003189 -0.000001 -0.000480 0.000000 -0.037530 0.000087
13 H 0.990807 0.008218 0.105364 0.000834 -0.229294 - 0.273219	13 H 0.146876 0.153594 0.041930 0.028052 -0.019924 - 0.128062
14 H 0.008218 0.990807 0.001530 0.105364 -0.000285 - 0.229294	14 H 0.000111 0.146876 0.000016 0.041931 -0.010764 - 0.019924
15 H 0.105364 0.001530 0.634479 0.001348 -0.150017 - 0.218039	15 H 0.022851 0.034241 0.075936 0.070513 -0.013415 0.164654
16 H 0.000834 0.105364 0.001348 0.634479 -0.000174 - 0.150017	16 H 0.000012 0.022851 0.000005 0.075936 -0.010671 - 0.013415
17 C -0.229294 -0.000285 -0.150017 -0.000174 9.288403 0.066386	17 C -0.055086 -0.019959 0.046658 -0.015211 -0.023234 0.009697
18 C -0.273219 -0.229294 -0.218039 -0.150017 0.066386 9.288403	18 C -0.011002 -0.055086 -0.012984 0.046658 0.001657 - 0.023234
19 H 0.146876 0.000111 0.022851 0.000012 -0.055086 - 0.011002	19 H 0.768535 0.006093 0.107147 0.000850 -0.214752 - 0.230233
20 H 0.153594 0.146876 0.034241 0.022851 -0.019959 - 0.055086	20 H 0.006093 0.768535 0.001928 0.107147 -0.000306 - 0.214752
21 H 0.041930 0.000016 0.075936 0.000005 0.046658 - 0.012984	21 H 0.107147 0.001928 0.762778 0.002510 -0.172131 - 0.238015
22 H 0.028052 0.041931 0.070513 0.075936 -0.015211 0.046658	22 H 0.000850 0.107147 0.002510 0.762778 -0.000193 - 0.172131
23 C -0.019924 -0.010764 -0.013415 -0.010671 -0.023234 0.001657	23 C -0.214752 -0.000306 -0.172131 -0.000193 9.002319 0.066899
24 C -0.128062 -0.019924 0.164654 -0.013415 0.009697 - 0.023234	24 C -0.230233 -0.214752 -0.238015 -0.172131 0.066899 9.002319
25 C 0.063563 0.000150 0.049776 0.000330 -0.981443 - 0.021284	25 C -0.008972 0.002193 0.010628 0.001576 -0.702595 - 0.267662
26 C 0.009909 0.063563 0.003785 0.049776 -0.059808 - 0.981443	26 C 0.011233 -0.008972 0.024516 0.010628 -0.008014 - 0.702595
27 C -0.015912 0.002482 -0.031565 0.001342 -0.696744 - 0.281371	27 C 0.009392 0.050298 0.002591 0.051339 -0.072234 - 0.797906
28 C 0.013320 -0.015912 0.018886 -0.031565 -0.008107 - 0.696744	28 C 0.000111 0.009392 0.000375 0.002591 -0.019587 - 0.072234
29 F -0.001068 0.000000 -0.002962 -0.000001 -0.042614 0.000128	29 F -0.000843 -0.000012 -0.010553 -0.000011 -0.015283 0.010476
30 F -0.001034 -0.001068 -0.005572 -0.002962 -0.000547 -0.042614	30 F -0.000038 -0.000843 -0.000401 -0.010553 0.000004 - 0.015283
31 F -0.003698 -0.000001 -0.000595 0.000000 -0.036121 0.000161	31 F -0.003814 -0.000015 0.000162 -0.000002 -0.033502 0.019385
32 F -0.005344 -0.003698 -0.000315 -0.000595 0.001147 - 0.036121	32 F -0.000233 -0.003814 -0.000062 0.000162 0.000009 - 0.033502
33 F -0.001439 -0.000013 -0.011942 0.000004 -0.023340 0.031888	33 F -0.001115 -0.001274 -0.005715 -0.003498 0.000325 - 0.069589
34 F -0.000041 -0.001439 -0.000239 -0.011942 0.000004 - 0.023340	34 F 0.000000 -0.001115 -0.000001 -0.005715 0.000259 0.000325
35 F -0.006378 -0.000030 0.000429 -0.000002 -0.018028 0.008775	35 F -0.006236 -0.003189 -0.000531 -0.000480 0.000460 - 0.037530
36 F -0.000373 -0.006378 -0.000057 0.000429 0.000011 - 0.018028	36 F -0.000001 -0.006236 0.000000 -0.000531 0.000087 0.000460
19 20 21 22 23 24	25 26 27 28 29 30
1 H 0.153594 0.000111 0.028052 0.000016 -0.128062 - 0.010764	1 H 0.009908 0.000150 0.013320 0.002482 -0.001034 0.000000
2 H 0.034241 0.000012 0.070513 0.000005 0.164654 - 0.010671	2 H 0.003785 0.000330 0.018886 0.001342 -0.005572 - 0.000001
3 C -0.019959 -0.011002 -0.015211 -0.012984 0.009697 0.001657	3 C -0.059808 -0.021284 -0.008107 -0.281371 -0.000547 0.000128
4 H 0.006093 0.006093 0.000850 0.001928 -0.230233 - 0.000306	4 H 0.011233 0.002193 0.000111 0.050298 -0.000038 - 0.000012
5 H 0.001928 0.000850 0.002510 0.002510 -0.238015 - 0.000193	5 H 0.024516 0.001576 0.000375 0.051339 -0.000401 - 0.000011
6 C -0.000306 -0.230233 -0.000193 -0.238015 0.066899 0.066899	6 C -0.008014 -0.267662 -0.019587 -0.797906 0.000004 0.010476
7 C 0.002193 0.011233 0.001576 0.024516 -0.267662 - 0.008014	7 C -0.021305 -0.021305 0.002473 -0.738180 -0.001969 0.000028
8 C 0.050298 0.000111 0.051339 0.000375 -0.797906 - 0.019587	8 C -0.738179 0.002473 -0.021424 -0.021424 -0.066281 0.000000
9 F -0.000012 -0.000038 -0.000011 -0.000401 0.010476 0.000004	9 F 0.000028 -0.001969 0.000000 -0.066281 -0.000067 - 0.000067

10 F -0.001462 -0.002499 0.000002 -0.075512 0.000000	10 F -0.000033 -0.000033 0.000000 -0.000075 0.000000 -
0.000001	0.155442
11 F -0.075360 0.000032 0.002579 -0.001555 -0.165193	11 F -0.000075 0.000000 -0.000047 -0.000047 0.000000
0.000000	0.000000
12 F -0.123902 -0.000009 -0.003586 -0.002794 0.000332	12 F -0.155442 0.000000 0.000000 0.000000 -0.000033 -
0.000000	0.000033
13 H 0.063563 0.009909 -0.015912 0.013320 -0.001068 -	13 H -0.003698 -0.005344 -0.001439 -0.000041 -0.006378
0.001034	-0.000373
14 H 0.000150 0.063563 0.002482 -0.015912 0.000000 -	14 H -0.000001 -0.003698 -0.000013 -0.001439 -0.000030
0.001068	-0.006378
15 H 0.049776 0.003785 -0.031565 0.018886 -0.002962 -	15 H -0.000595 -0.000315 -0.011942 -0.000239 0.000429
0.005572	-0.000057
16 H 0.000330 0.049776 0.001342 -0.031565 -0.000001 -	16 H 0.000000 -0.000595 0.000004 -0.011942 -0.000002
0.002962	0.000429
17 C -0.981443 -0.059808 -0.696744 -0.008107 -0.042614	17 C -0.036121 0.001147 -0.023340 0.000004 -0.018028
-0.000547	0.000011
18 C -0.021284 -0.981443 -0.281371 -0.696744 0.000128	18 C 0.000161 -0.036121 0.031888 -0.023340 0.008775 -
-0.042614	0.018028
19 H -0.008972 0.011233 0.009392 0.000111 -0.000843 -	19 H -0.003814 -0.000233 -0.001115 0.000000 -0.006236
0.000038	-0.000001
20 H 0.002193 -0.008972 0.050298 0.009392 -0.000012 -	20 H -0.000015 -0.003814 -0.001274 -0.001115 -0.003189
0.000843	-0.006236
21 H 0.010628 0.024516 0.002591 0.000375 -0.010553 -	21 H 0.000162 -0.000062 -0.005715 -0.000001 -0.000531
0.000401	0.000000
22 H 0.001576 0.010628 0.051339 0.002591 -0.000011 -	22 H -0.000002 0.000162 -0.003498 -0.005715 -0.000480
0.010553	-0.000531
23 C -0.702595 -0.008014 -0.072234 -0.019587 -0.015283	23 C -0.033502 0.000009 0.000325 0.000259 0.000460
0.000004	0.000087
24 C -0.267662 -0.702595 -0.797906 -0.072234 0.010476	24 C 0.019385 -0.033502 -0.069589 0.000325 -0.037530
-0.015283	0.000460
25 C 9.091995 -0.021305 -0.697086 0.002473 0.149952 -	25 C 0.203568 -0.002499 -0.065045 0.000032 -0.084400 -
0.001969	0.000009
26 C -0.021305 9.091996 -0.738179 -0.697086 0.000028	26 C -0.001462 0.203568 -0.075360 -0.065045 -0.123902
0.149952	-0.084400
27 C -0.697086 -0.738179 9.020653 -0.021424 -0.108543	27 C -0.091132 -0.075512 0.080345 -0.001555 0.277353 -
-0.066281	0.002794
28 C 0.002473 -0.697086 -0.021424 9.020653 0.000000 -	28 C 0.000002 -0.091132 0.002579 0.080345 -0.003586
0.108543	0.277353
29 F 0.149952 0.000028 -0.108543 0.000000 9.610243 -	29 F -0.010151 0.000001 -0.142879 0.000000 0.000340
0.000067	0.000000
30 F -0.001969 0.149952 -0.066281 -0.108543 -0.000067	30 F 0.000000 -0.010151 -0.165193 -0.142879 0.000332
9.610243	0.000340
31 F 0.203568 -0.001462 -0.091132 0.000002 -0.010151	31 F 9.510338 -0.000033 0.000359 0.000000 -0.141220
0.000000	0.000000
32 F -0.002499 0.203568 -0.075512 -0.091132 0.000001 -	32 F -0.000033 9.510338 -0.000075 0.000359 -0.155442 -
0.010151	0.141220
33 F -0.065045 -0.075360 0.080345 0.002579 -0.142879 -	33 F 0.000359 -0.000075 9.641885 -0.000047 -0.009856
0.165193	0.000000
34 F 0.000032 -0.065045 -0.001555 0.080345 0.000000 -	34 F 0.000000 0.000359 -0.000047 9.641886 0.000000 -
0.142879	0.009856
35 F -0.084400 -0.123902 0.277353 -0.003586 0.000340	35 F -0.141220 -0.155442 -0.009856 0.000000 9.473790 -
0.000332	0.000033
36 F -0.000009 -0.084400 -0.002794 0.277353 0.000000	36 F 0.000000 -0.141220 0.000000 -0.009856 -0.000033
0.000340	9.473790
31 32 33 34 35 36	Mulliken atomic charges:
1 H -0.005344 -0.000001 -0.000041 -0.000013 -0.000373 -	1
0.000030	1 H 0.121905
2 H -0.000315 0.000000 -0.000239 0.000004 -0.000057 -	2 H 0.257900
0.000002	3 C -0.343389
3 C 0.001147 0.000161 0.000004 0.031888 0.000011	4 H 0.235521
0.008775	5 H 0.227768
4 H -0.000233 -0.000015 0.000000 -0.001274 -0.000001 -	6 C -0.257527
0.003189	7 C 0.256594
5 H -0.000062 -0.000002 -0.000001 -0.003498 0.000000 -	8 C 0.217403
0.000480	9 F -0.195417
6 C 0.000009 0.019385 0.000259 -0.069589 0.000087 -	10 F -0.173872
0.037530	11 F -0.179419
7 C -0.002499 -0.001462 0.000032 -0.075360 -0.000009 -	12 F -0.167466
0.123902	13 H 0.121905
8 C -0.075512 0.000002 -0.001555 0.002579 -0.002794 -	14 H 0.121905
0.003586	15 H 0.257900
9 F 0.000001 0.000000 0.000000 -0.165193 0.000000	16 H 0.257900
0.000332	17 C -0.343389

```

18 C -0.343389
19 H 0.235521
20 H 0.235521
21 H 0.227768
22 H 0.227768
23 C -0.257527
24 C -0.257527
25 C 0.256594
26 C 0.256594
27 C 0.217403
28 C 0.217402
29 F -0.195417
30 F -0.195417
31 F -0.173872
32 F -0.173872
33 F -0.179419
34 F -0.179419
35 F -0.167466
36 F -0.167466
Sum of Mulliken atomic charges = 0.00000
Mulliken charges with hydrogens summed into heavy atoms:
1
3 C 0.119900
6 C -0.257527
7 C 0.256594
8 C 0.217403
9 F -0.195417
10 F -0.173872
11 F -0.179419
12 F -0.167466
17 C 0.119900
18 C 0.499705
23 C 0.122278
24 C 0.122278
25 C 0.256594
26 C 0.256594
27 C 0.217403
28 C 0.217402
29 F -0.195417
30 F -0.195417
31 F -0.173872
32 F -0.173872
33 F -0.179419
34 F -0.179419
35 F -0.167466
36 F -0.167466
Sum of Mulliken charges with hydrogens summed into heavy
atoms = 0.00000
1|1|UNPC-DESKTOP-JEE8NSQ|SP|RPBEPBE|3-
21G/Auto|C12H12F12|GALKI|12-May-
2022|0|# pbepbe/3-21g/auto||Title Card Required||0,1|H,-
2.1047049961,
1.4495675915.0.|H,-
1.9880779861,0.1892708171,1.3523389289|C,-3.4487724
161,0.4106412532,0.4071527244|H,-
3.7431893861,1.3840102224,0.0743292006
6|H,-3.6224849261,0.1189660285,1.4218692093|C,-
5.0940846961,0.35952798
68,0.4558628709|C,-4.2649541761,-0.3914692866,-
0.3090637292|C,-2.61964
18661,-0.3403560125,-0.357773882|F,-3.8934934861,-
1.6195516301,0.11085
38135|F,-4.0457841561,-0.0234678354,-1.5893134841|F,-
2.2412803361,-1.5
636165968,0.0699831884|F,-2.3884265561,0.0264774621,-
1.6362388407|H,1.
1832029239,1.4495675915.0.|H,4.4711108339,1.4495675915.0.|
H,1.29982993
39,0.1892708171,1.3523389289|H,4.5877378439,0.1892708171,1.
3523389289|
C,-
0.1608644961,0.4106412532,0.4071527244|C,3.1270434139,0.41
06412532,
0.4071527244|H,-
0.4552814661,1.3840102224,0.0743292006|H,2.8326264439,
1.3840102224,0.0743292006|H,-
0.3345770061,0.1189660285,1.4218692093|H,
2.9533309039,0.1189660285,1.4218692093|C,-
1.8061767861,0.3595279868,0.
4558628709|C,1.4817311339,0.3595279868,0.4558628709|C,-
0.9770462561,-0
.3914692866,-0.3090637292|C,2.3108616539,-0.3914692866,-
0.3090637292|C
.6682660439,-0.3403560125,-0.357773882|C,3.9561739639,-
0.3403560125,
-0.357773882|F,-0.6055855761,-
1.6195516301,0.1108538135|F,2.6823223439
,-1.6195516301,0.1108538135|F,-0.7578762461,-0.0234678354,-
1.589313484
1|F,2.5300316739,-0.0234678354,-
1.5893134841|F,1.0466275839,-1.5636165
968,0.0699831884|F,4.3345354939,-
1.5636165968,0.0699831884|F,0.8994813
539,0.0264774621,-
1.6362388407|F,4.1873892739,0.0264774621,-1.63623884
07|TV,9.86372375,0.,0.||Version=IA32W-G09RevB.01|HF=-
1648.0823348|RMSD
=-2.809e-008|PG=C01 [X(C12H12F12)]||@
THERE ARE TWO THINGS THAT EVERYBODY THINKS
THEY CAN DO BETTER THAN
ANYONE ELSE - PUNCH THE FIRE, AND EDIT A DAILY
PAPER.
-- UNCLE ESEK, "CENTURY MAGAZINE", 1885
Job cpu time: 0 days 0 hours 13 minutes 39.0 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 205 Int= 0 D2E= 0 Chk=
10 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 09 at Thu May 12 14:31:15 2022.

```