

Supplementary Information: Multiplet structure of chromium(III) dopants in wide band gap materials

Ilya Popov ^a, Petros-Panagis Filippatos ^a, Shayantan Chaudhuri ^a, Andrei L.
Tchougréeff ^b, Katherine Inzani ^a, and Elena Besley* ^a

^a *School of Chemistry, University of Nottingham, Nottingham, NG7 2RD, United
Kingdom*

^b *Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry of the Russian
Academy of Sciences, Moscow, 119071, Russia*

* *E-mail: Elena.Besley@nottingham.ac.uk*

Structures of all systems considered in the manuscript opti- mised with r²SCAN and HSE06 functionals

Here, we provide crystal structures of four system considered in this work: Cr³⁺:Al₂O₃, Cr³⁺:AlB₄O₆N, Cr³⁺:BeAl₂O₄ (*C_s*) and Cr³⁺:BeAl₂O₄ (*C_i*) optimised with two DFT functionals: r²SCAN and HSE06. First line of every structure specifies the type of the system and the functional that was used for geometry optimisation.

Cr:AL2O3 optimised with r2SCAN

1.0000000000000000

9.5099287033000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-4.7549643517000000	8.2358398451999992	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	12.9827966690000007

Cr	Al	O
1	47	72

Direct

0.5000001334799029	0.5000002060993880	0.3491658111768497
0.1666382845128986	0.3332791511453660	0.8147808971962771
0.1666668259185974	0.8333335626504534	0.8149634203037339
0.6667210394320682	0.3333592532280202	0.8147809302800303
0.6666413280818873	0.8333620856448546	0.8147807747231822
0.3329294484196804	0.1666458289479147	0.6854671338135891
0.3337164561589516	0.6670707083357994	0.6854670880491338
0.8333335351957281	0.1666667845430753	0.6854924494926474
0.8333545001093516	0.6662839467444658	0.6854670172558592
0.9996405869598365	0.9996569395915997	0.6485983484311363
0.0003432660246438	0.4999836945551231	0.6485983888365455
0.5000163425890332	0.0003596498483208	0.6485983805369342
0.5000000129094394	0.5000000214827923	0.6478005863559601
0.1660883533869021	0.3324347007533339	0.5190661771441131
0.1666665691865540	0.8333332848868704	0.5186680022057629
0.6675652267393376	0.3336536133276167	0.5190661261228267
0.6663463809200503	0.8339114556130499	0.5190661601145276
0.9997562330526465	0.0000578150660551	0.1481765962682805
0.9999419582231656	0.4996982089536166	0.1481765407958149
0.5003015404745955	0.0002437271152725	0.1481766669450938
0.5000000759138646	0.5000000958051576	0.1461986174342064
0.1664454853980343	0.3333437559043645	0.0182759689228555
0.1666667475895917	0.8333333827706166	0.0183848670668458
0.6666562229191554	0.3331016203382222	0.0182759207444133
0.6668983279878491	0.8335545844538782	0.0182760107146987
0.3333525016589157	0.1666813346556285	0.9811234626705692
0.3333288181534100	0.6666475102301546	0.9811234578429276
0.8333333225567719	0.1666666875187539	0.9814677574049109
0.8333187492345986	0.6666711799863339	0.9811234418975622
0.9999892174709238	0.9999638994701923	0.8519649412382527
0.0000364370545936	0.5000253149951490	0.8519650264026202
0.4999747283867703	0.0000111384856704	0.8519650331768451
0.5000000191853406	0.5000000054100775	0.8515493462378285
0.3330504252102049	0.1653662884487862	0.4821704395836514
0.3323158600277389	0.6669493577526494	0.4821703680452459
0.8333335497109948	0.1666668832405612	0.4818124941316527
0.8346335616108369	0.6676840895507790	0.4821703045797556
0.9999022035655817	0.9997088128188333	0.3520084614233296
0.0002908903856060	0.5001930275554183	0.3520083253368256
0.4998065065431904	0.0000976825280141	0.3520085899634681
0.1648732254557401	0.3319500829746334	0.3153243663809686
0.1666664455906660	0.8333331575238353	0.3151282879814694
0.6680496355768925	0.3329229329356003	0.3153243260477842
0.6670768357663719	0.8351268098354712	0.3153243533231157
0.3322376239259620	0.1651107164682494	0.1844495202033644
0.3328728938266816	0.6677619836160360	0.1844495517523424
0.8333332874325002	0.1666666494628155	0.1850746221682367
0.8348889327858265	0.6671267289281794	0.1844495235244117
0.1795389848580988	0.1658957573845661	0.5843930806519343
0.1801809375245629	0.6667860978532810	0.5836333991688045
0.6802952238284964	0.1668685960116154	0.5837715415568578
0.6802942978796944	0.6667015857329035	0.5832871947766811
0.3468505040738089	0.3469879201037931	0.7500117260470400

0.3468067305470054	0.8469675118754120	0.7503927757645518
0.8470322333682889	0.3468057929104083	0.7503468639189887
0.8468005830462471	0.8466687240149189	0.7501287335407538
0.4864073555551370	0.3197057734713741	0.5832872026968113
0.4863568601244934	0.8204611331777950	0.5843930644942082
0.9865734494048685	0.3197048837415338	0.5837715648554014
0.9866052791233620	0.8198190267154284	0.5836332651747784
0.3332139093657487	0.0133947862808930	0.5836334194696871
0.3332984335655920	0.5135927156180251	0.5832872192071077
0.8331312847269045	0.0134266530555716	0.5837714830853352
0.8341042875796342	0.5136432437394285	0.5843931076561536
0.9997737572056861	0.1529682185979427	0.7503468918886771
0.0001608603595409	0.6531934367637571	0.7503927669540493
0.4998679100200029	0.1531996185539712	0.7501289041904213
0.5001376799302467	0.6531498461586390	0.7500117167551019
0.1530329728299480	0.9998394603176911	0.7503928086948556
0.1533318666782981	0.5001324069838314	0.7501289177202769
0.6531943390644742	0.0002265546210688	0.7503468836729853
0.6530124273306238	0.4998628949266412	0.7500117484151306
0.0135002687526071	0.3333144799351038	0.9166740368581574
0.0135405240066185	0.8332958878523534	0.9166977113869987
0.5135373561551724	0.3333524635797983	0.9164842981178044
0.5135282726082935	0.8333854995412229	0.9165864297601453
0.1799307538312920	0.0133312768462163	0.0832402350053970
0.1798844569331328	0.5137179508133337	0.0828676303684909
0.6802535181481940	0.0134627418594747	0.0832628663272320
0.6805278406889921	0.5137211502073172	0.0827200034293599
0.3198151960852212	0.4864627804041033	0.9164843330344263
0.3197553898795034	0.9864594833073622	0.9166977739531617
0.8198573302163523	0.4864718417736602	0.9165864399617474
0.8198142421808616	0.9864997108176951	0.9166740060994234
0.1666145854423497	0.1801428233012338	0.9165864812567334
0.1667041781160453	0.6802447418141151	0.9166977721447603
0.6666855476899159	0.1801857920536733	0.9166740382430001
0.6666477447056308	0.6801850979214978	0.9164841740404402
0.3331932925280289	0.3194720684519216	0.0827201427539379
0.3334005306487036	0.8200691411762813	0.0832402783091473
0.8332092140069900	0.3197462637831652	0.0832627593845793
0.8338335297735211	0.8201155143962015	0.0828675487259865
0.4862820066486139	0.1661664707379102	0.0828676823986056
0.4862787447801130	0.6668066790724224	0.0827201095787460
0.9865371107959405	0.1667907005839287	0.0832628580293894
0.9866686391985484	0.6665994318042686	0.0832401795060909
0.3466834304050895	0.9997286716282281	0.2499396184651214
0.3427787207761722	0.4981675097619344	0.2473072495507793
0.8471281551410558	0.0003737759520964	0.2498854294637044
0.8470840161097074	0.5001561931608406	0.2498431179930455
0.0117986955100188	0.1790092941225106	0.4167529825225185
0.0141851446040843	0.6803417983163504	0.4169491437482212
0.5135204423226185	0.1803864818448527	0.4165953726632552
0.5141659209157974	0.6873937106493841	0.4182531990621215
0.1530721779126259	0.1529155959511615	0.2498433187474905
0.1530452724324695	0.6533164275694562	0.2499395294120761
0.6532453827811622	0.1528716271036629	0.2498855656404398
0.6553887724461428	0.6572215260785815	0.2473071665531540
0.9996262855680285	0.3467543163067291	0.2498855088426060
0.0002710584231126	0.8469545562385146	0.2499395629197347
0.5018322867390501	0.3446110841339401	0.2473072741012542
0.4998432221648723	0.8469276800727160	0.2498433695018192
0.1668661839167551	0.4864793862747826	0.4165953144399678
0.1661565822803845	0.9858145999390835	0.4169491934536415

0.6732274251694378	0.4858337203645858	0.4182531695382872
0.6672106701460973	0.9882013091439086	0.4167529645153218
0.3126062973663047	0.3267722499592098	0.4182532014216085
0.3196579844809218	0.8338432518595694	0.4169492396254167
0.8209905085242308	0.3327892355953427	0.4167529729015952
0.8196132333526203	0.8331338791307510	0.4165953316379603

Cr:Al2O3 optimised with HSE06

1.0000000000000000

9.5053443908999995	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-4.7526721953999997	8.2318697142000001	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	12.9672012329000008

Cr	Al	O
1	47	72

Direct

0.1666622046383495	0.3333284387352009	0.8176103682872125
0.1668722448700848	0.8335955124827379	0.8145406851295007
0.6667222174266314	0.3331265305104196	0.8145412611542326
0.6664048187248071	0.8332780423828368	0.8145395099749848
0.3337366364499132	0.1658012879885860	0.6846500332428533
0.3341986201913656	0.6679368525175775	0.6846495583952361
0.8320670054937551	0.1662619672971317	0.6846495552459118
0.8333311578573870	0.6666646499254441	0.6850270680557671
0.9992141543314048	0.9995337638445960	0.6474956085583727
0.0003217412106764	0.5007868373496649	0.6474930806568011
0.4999978332309070	0.9999984615026563	0.6479077524126211
0.5004652095081212	0.4996805833692122	0.6474927255454830
0.1666652765114733	0.3333310909675404	0.5188374019364375
0.1666566559229921	0.8335702057574395	0.5181827236193044
0.6669104446332312	0.3333422741477037	0.5181802048985347
0.6664291656622652	0.8330846969162238	0.5181821804479512
0.0000010986270595	0.9997504607034671	0.1482543012674213
0.9997514298865156	0.4999997059408017	0.1482530987447106
0.5000004838544925	0.9999984842357037	0.1481738159256452
0.5002508038341347	0.5002510190490170	0.1482536451798566
0.1666657591378282	0.3333324042413253	0.0207915918274324
0.1664213618561661	0.8332587828720861	0.0186181478686009
0.6668378203270109	0.3335792685535779	0.0186175549739289
0.6667413499262480	0.8331609276929512	0.0186173242612924
0.3342566218054159	0.1661776327708111	0.982045588786601
0.3338238396938991	0.6680815482001421	0.9820456320026949
0.8319195505837840	0.1657407084848330	0.9820456796200290
0.8333327557256283	0.6666666133382506	0.9815687387831034
0.9985599375039484	0.9980252868878381	0.8514004215614932
0.9994634304470651	0.5014392205546017	0.8513997111040368
0.4999988177014103	0.9999994698568742	0.8517093125697457
0.5019748407501581	0.5005361150613226	0.8513997613013942
0.3336430430576982	0.1669443526752872	0.4811270746414422
0.3330562096655427	0.6666973911055223	0.4811267968109263
0.8333048592650627	0.1663581518782706	0.4811259534704959
0.8333336234082793	0.6666665804764733	0.4811649208059237
0.9999505026267457	0.9999727526319120	0.3520061813717774
0.0000224549966674	0.5000510656441861	0.3520064093074140
0.5000011020246760	0.0000020879340070	0.3518755751738638
0.5000337240876789	0.4999814983195066	0.3520069112300064
0.1666663840445892	0.3333328595264362	0.3149309373842897
0.1666751813808602	0.8333353056707367	0.3145799734459942
0.666658222436972	0.3333242104009386	0.3145793041076743
0.6666651572231075	0.8333409200535087	0.3145784032282606
0.3333153186981548	0.1665974843554210	0.1856878731412124
0.3334017691369198	0.6667191839830622	0.1856863371952073
0.8332837104794919	0.1666831696478752	0.1856869457258838
0.8333345532188190	0.6666696733885260	0.1853935319112594
0.1803281975044939	0.1666847690337576	0.5833375583248710
0.1802976017362568	0.6673386081700059	0.5823425706341681
0.6801007069164555	0.1665821558824803	0.5830872132708933
0.6801057121786016	0.6664992944638044	0.5829657634976115
0.3536592203101208	0.3475987607212545	0.7484185377924746

0.3470145649152414	0.8475238172849089	0.7497251259684887
0.8470485883651548	0.3468657537971396	0.7500506860223624
0.8458173436722873	0.8452217263460255	0.7499382495470357
0.4870409303402354	0.3197027644317458	0.5823430812466128
0.4864823717533895	0.8199003330404935	0.5830872561940907
0.9863569332770865	0.3196727287048446	0.5833375877844631
0.9863937708158730	0.8198916825319316	0.5829656941776804
0.3334184787795778	0.0135183928559570	0.5830875749315396
0.3333142775648099	0.5136426639443101	0.5833371218608079
0.8326616390683199	0.0129586332972309	0.5823426779110932
0.8334990790373098	0.5136048510433397	0.5829662573000221
0.9939340820628360	0.1463373182254273	0.7484194526619348
0.9994047220209623	0.6541801354105701	0.7499383350031152
0.5005092693560371	0.1529849954710727	0.7497251714752053
0.4998159456976197	0.6529508483793265	0.7500505871817467
0.1531347489598431	0.0001823435080937	0.7500514353375820
0.1524021778118509	0.5060652144742974	0.7484182450395593
0.6524750186859762	0.9994923501041910	0.7497237470991820
0.6547734916791867	0.5005919106085699	0.7499382005964463
0.0115418312676638	0.3350795913109863	0.9190328359930149
0.0134544549276399	0.8329296896277754	0.9167730988990641
0.5135226023292958	0.3331933763488450	0.9168008583460718
0.5136276330164762	0.8335829634482153	0.9167420652921976
0.1804064638800753	0.0132850986775281	0.0837841450483197
0.1804193155605347	0.5138365890575045	0.0838975432309255
0.6800928015258378	0.0133709048404924	0.0834692909885035
0.6801553700649734	0.5135807878501168	0.0834505723081378
0.3235358855120793	0.4884583695327080	0.9190327882427241
0.3199549356069582	0.9863722706828781	0.9167432753375095
0.8194755873199995	0.4865448842090885	0.9167723909095784
0.8196692511707724	0.9864758415370289	0.9168007325777907
0.1649212014822297	0.1764641350710434	0.9190333451087653
0.1668060649617900	0.6803293929091936	0.9168005242799921
0.6664166453609894	0.1800446807034461	0.9167430141345605
0.6670685284921163	0.6805231174155324	0.9167721766546819
0.3334172516482852	0.3195809758472450	0.0838978223365459
0.3332785714952422	0.8199080768295062	0.0834689257814176
0.8328796138277710	0.3195955507217789	0.0837847623141883
0.8334285501645340	0.8198461138526838	0.0834493473494788
0.4866292695611847	0.1667217068299252	0.0834697743595640
0.4867139988612550	0.6671183183606075	0.0837845777727608
0.9861639651189265	0.1665835969638110	0.0838976840614407
0.9864186288499042	0.6665719168025390	0.0834495549112262
0.3469519729314499	0.0000062219330843	0.2499694148765883
0.3468890677921266	0.4999601476976920	0.2501133951002785
0.8468841823753124	0.9999663766522104	0.2500531411129288
0.8469303898708276	0.5000063992130848	0.2500027900593977
0.0136248590637962	0.1802274862225488	0.4165989401433663
0.0134650999756616	0.6803367009653201	0.4163539820421605
0.5135968420252155	0.1801453364008481	0.4163153263271724
0.5133922455067648	0.6801710795467955	0.4165295174600345
0.1530712384193436	0.1531146989064140	0.2501140544685825
0.1530799522365740	0.6531156560316873	0.2500539122207215
0.6530557864677249	0.1530502487494374	0.2499692349713882
0.6530765937871124	0.6530724638196048	0.2500043401234109
0.0000444025612936	0.3469314680475222	0.2501137782138798
0.9999968122434879	0.8469233411460380	0.2500045508608437
0.5000344083972195	0.3469188404153556	0.2500527703590549
0.4999950720289874	0.8469453620121214	0.2499698271107320
0.1666019214640855	0.4863761778644999	0.4165981301530834
0.1667783430925951	0.9866080247307210	0.4165295941128235

0.6668719127506080	0.4865348433287551	0.4163533896234739
0.6665503492908442	0.9864048693201326	0.4163153957791792
0.3197730693090719	0.3333982409778997	0.4165988765288660
0.3198555861500409	0.8334510640989308	0.4163152821002143
0.8198295980213857	0.3332219415376514	0.4165293715675773
0.8196627558403335	0.8331283373902352	0.4163542852039157

Cr:AlB4O6N optimised with r2SCAN

1.0000000000000000

10.0705041884999993	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-5.0352520942999996	8.7213124561999997	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	16.4794425963999984

Cr	Al	B	O	N
1	15	64	96	16

Direct

0.1666673410598300	0.3333337401808334	0.5301422962752029
0.1666666847477674	0.3333333185657683	0.0303711652087408
0.1667389296882288	0.8333694798538709	0.0303644985582935
0.1666351754291185	0.8333176618366123	0.5303347715962643
0.6666305351528956	0.3332610895593388	0.0303644974377485
0.6666823645667748	0.3333648518820798	0.5303347712655019
0.6666304786624149	0.8333695469609276	0.0303644859458080
0.6666823012682687	0.8333176323868047	0.5303347732810227
0.3333983693424528	0.1666016254437748	0.2802136877955977
0.3334249422583321	0.1665750108150875	0.7805700795904739
0.3333983868569378	0.6667966914752389	0.2802137176180443
0.3334249645249739	0.6668498690935354	0.7805697758682444
0.8332033025956578	0.1666016215623069	0.2802137110031380
0.8331501042288354	0.1665750830818596	0.7805698996097022
0.8333333523786940	0.6666666405198854	0.2799578908043552
0.8333333455835082	0.6666666954060027	0.7805180844410275
0.4155935238725531	0.0844064856529126	0.1239634536112827
0.4157893258322286	0.0842106416187676	0.6240685199997814
0.4156165241968517	0.5844531580821638	0.1239225214088833
0.4171173729653860	0.5859398742354428	0.6246878019206398
0.9155468524397238	0.0843834875763553	0.1239225203969173
0.9140600538973320	0.0828827105538547	0.6246879595406241
0.9155570671779329	0.5844429371947578	0.1237604706857317
0.9154700095364112	0.5845298955916158	0.6241205565986634
0.4156165253751743	0.3311634653944059	0.1239225366041410
0.4171173515465644	0.3311774830520243	0.6246878889467736
0.4155934677175737	0.8311871247989153	0.1239634839969312
0.4157892703762214	0.8315787435536445	0.6240685241078804
0.9155469232867446	0.3311634517023506	0.1239225630797449
0.9140598918948526	0.3311776434439090	0.6246877172487882
0.9155569070785244	0.8311139792278476	0.1237604337146134
0.9154701478816913	0.8309403793714388	0.6241206733418899
0.1688365431098346	0.0843834826791829	0.1239225342701825
0.168822454224438	0.0828825414287453	0.6246879420148578
0.1688365643625728	0.5844530929905934	0.1239225631784234
0.1688223188387643	0.5859398760132063	0.6246877154797271
0.6688128849384809	0.0844065440745336	0.1239634832209130
0.6684211867514351	0.0842107770921944	0.6240685282816949
0.6688860240745077	0.5844430984474649	0.1237604442853288
0.6690596241982405	0.5845298161750035	0.6241206261674664
0.0840441344871088	0.4159559558941883	0.3728527787145433
0.0844011451490488	0.4155988228024467	0.8740144814977350
0.0842398192990881	0.9152026925088054	0.3736996477620365
0.0844235038549241	0.9155288996690679	0.8741159209266050
0.5847973182680973	0.4157601715955195	0.3736996469356704
0.5844710916393806	0.4155764984801655	0.8741158825676177
0.5844214339355311	0.9155785669269738	0.3740229494377469
0.5844116308953258	0.9155884196977718	0.8740790172720168
0.0840441351859090	0.1680880499233983	0.3728527668783285
0.0844011481453801	0.1688022058107601	0.8740144978575511
0.0842398668461866	0.6690370476108991	0.3736996784188373
0.0844235009884701	0.6688945207285230	0.8741159036211813
0.5844214372804829	0.1688428099611326	0.3740229707747015

0.5844115914328010	0.1688231179882842	0.8740790667606906
0.5847972803135919	0.6690370314857489	0.3736996746716802
0.5844711440771242	0.6688945493912473	0.8741159378382533
0.3319121005725919	0.4159558836405933	0.3728526377931285
0.3311977820373017	0.4155988211143763	0.8740145049768877
0.3311571965847415	0.9155785691774434	0.3740229694868973
0.3311768823085855	0.9155883864450427	0.8740790627532461
0.8309629780273881	0.4157601520871151	0.3736996801691013
0.8311054928799918	0.4155765348586256	0.8741159066823497
0.8309629622550579	0.9152026968020051	0.3736996743903192
0.8311054753985457	0.9155289091118002	0.8741159291594705
0.9989137637254171	0.9978273408248552	0.4949041534924635
0.0000082066744196	0.0000163714889110	0.9951297370822202
0.9989135620394972	0.5010863218785599	0.4949041515782716
0.0000082388514138	0.4999917802452352	0.9951297510192041
0.4999999817808374	0.0000000287451924	0.4951344942501186
0.5000000162194012	0.9999999936642222	0.9951734858496855
0.5021727847844119	0.5010861895929877	0.4949040339736648
0.4999836476544806	0.4999917971692997	0.9951297384148020
0.9997522791256271	0.9995046242846087	0.2448155564857104
0.9995685597739782	0.9991371677916729	0.7455131638424244
0.9997523381521202	0.5002476816935443	0.2448155975170696
0.9995685129256552	0.5004314620385633	0.7455126888684925
0.4999999710802552	0.0000000324231772	0.2451499843017869
0.4999999669807830	0.0000000620341053	0.7452636250132563
0.5004954028043999	0.5002477355573746	0.2448155412361441
0.5008628211238526	0.5004313879392108	0.7455129793921946
0.2542399448824131	0.2457600567780072	0.0969182640326940
0.2563909299545297	0.2436089372683518	0.5990351202392211
0.2542771437825283	0.7458173668281930	0.0969191260739343
0.2542429518614674	0.7467777280753709	0.5971723337453113
0.7541826423324969	0.2457228679923549	0.0969191280893527
0.7532221262279660	0.2457570828188356	0.5971723519696076
0.7542235810837969	0.7457764195201201	0.0967745352169906
0.7542651375183682	0.7457348457736473	0.5970382896583150
0.2542772694793480	0.0084599307074912	0.0969190634712598
0.2542430479714923	0.0074654281086717	0.5971722975537046
0.254239955939340	0.5084799568864551	0.0969182641939564
0.2563909462861983	0.5127820356928252	0.5990354894509301
0.7541825711136684	0.0084600299802033	0.0969190490548856
0.7532222750759240	0.0074655634222750	0.5971722775844217
0.7542237287474967	0.5084475097449616	0.0967744830283679
0.7542651747283347	0.5085305800785734	0.5970381782238439
0.4915400724312375	0.2457227374864697	0.0969190633445062
0.4925345073500178	0.2457569277436955	0.5971722679120820
0.4915399752286808	0.7458174361002416	0.0969190438103209
0.4925344363296951	0.7467776022191412	0.5971723010588059
0.9915200570869666	0.2457600144023906	0.0969182598952193
0.9872177714926453	0.2436091916430468	0.5990354147706776
0.9915524987014497	0.7457762745337836	0.0967744850360302
0.9914694094783768	0.7457348472857682	0.5970382013077380
0.2456874536767412	0.2543124337557588	0.3462347230920969
0.2457364604498611	0.2542635070214833	0.8469188961530790
0.2457085156271042	0.7542286855616347	0.3469354345890173
0.2457752642859164	0.7543274238810438	0.8470518488270168
0.7457713198338967	0.2542914948908425	0.3469354265580727
0.7456725622996681	0.2542247461511362	0.8470518759791865
0.7457470354893561	0.7542529381627330	0.3463703520772831
0.7457231701117469	0.7542768581558362	0.8469898686558526
0.2456874335179760	0.4913747962456461	0.3462347789301752
0.2457364044016264	0.4914726699440298	0.8469188468563941

0.2457084215875567	0.9914796020114539	0.3469353621288355
0.2457751409226709	0.9914475894088439	0.8470517612633963
0.7457470040101082	0.4914938606227511	0.3463702731203132
0.7457230930190922	0.4914461051570688	0.8469898021789145
0.7457712501276907	0.9914796005095317	0.3469353646642583
0.7456725696092183	0.9914476299749495	0.8470517285494750
0.0086252173724326	0.2543125771648287	0.3462347528463187
0.0085272935658447	0.2542635598989135	0.8469188406166057
0.0085061488167775	0.7542530073282185	0.3463702732074159
0.0085539049369607	0.7542769141109907	0.8469898226843758
0.5085203843983079	0.2542915750967073	0.3469353685202999
0.5085523905134793	0.2542248479143889	0.8470517470986234
0.5085203890030420	0.7542287415002414	0.3469353745065585
0.5085523947076031	0.7543274911733854	0.8470517802759717
0.4209880069121083	0.0790120061842921	0.2135701582226416
0.4210033848543625	0.0789966318909165	0.7136735581017334
0.4211963339771935	0.5791689739408579	0.2134497050389002
0.4224740421520886	0.5800484947673509	0.7141273927610593
0.9208310256246307	0.0788036672071628	0.2134497029167517
0.9199514913846416	0.0775259415531938	0.7141280464451881
0.9208590750336769	0.5791409277000493	0.2132651142291492
0.9207150326635349	0.5792850219140366	0.7137189946181662
0.4211963083371992	0.3420274511612165	0.2134496996328069
0.4224739072708100	0.3424256628690519	0.7141280530706879
0.4209879429265034	0.8419760922805828	0.2135701713416409
0.4210034087051194	0.8420069675544875	0.7136735282487172
0.9208311951759726	0.3420274379222201	0.2134497437310749
0.9199516177292577	0.3424257031791430	0.7141271375071153
0.9208590196372961	0.8417181856657000	0.2132650959683662
0.9207151034237261	0.8414303298121570	0.7137191472999682
0.1579725398317632	0.0788036837515351	0.2134496976249308
0.1575743186905731	0.0775259914639622	0.7141280694952028
0.1579725700882572	0.5791688002759330	0.2134497437141095
0.1575743311104641	0.5800482919990371	0.7141271167180621
0.6580239163925929	0.0790120584384893	0.2135701723858708
0.6579930610023483	0.0789965760116354	0.7136735510253895
0.6582818241332103	0.5791409737715960	0.2132650965466082
0.6585697259501287	0.5792847826044456	0.7137190889996871
0.0768531727541377	0.4231470056928129	0.4616361674821129
0.0790512897764368	0.4209486909600054	0.9635967282390694
0.0782480263621610	0.9193816533874158	0.4634141658998220
0.0790572629141292	0.9209420163101855	0.9636545598827374
0.5806183735636948	0.4217519419438773	0.4634141754752347
0.5790579892629112	0.4209427375798609	0.9636545490764136
0.5790308118532236	0.9209691660707502	0.4635919043653238
0.5790238144087320	0.9209762416997492	0.9636491512716000
0.0768532362259533	0.1537061473735502	0.4616361066059582
0.0790512843923733	0.1581024727894212	0.9635967330252387
0.0782481395130048	0.6588663284799362	0.4634141963783850
0.0790572183783297	0.6581151212170308	0.9636545725272316
0.5790307736035470	0.1580616582507506	0.4635919126724916
0.5790237712296272	0.1580475069772825	0.9636491963379190
0.5806181162516901	0.6588662517146642	0.4634142037070290
0.5790579816324907	0.6581151670332380	0.9636545809456804
0.3462943173045824	0.4231465563571851	0.4616355642860031
0.3418975276690003	0.4209487045850800	0.9635967363280921
0.3419383509899442	0.9209692220185803	0.4635919114112775
0.3419524941818383	0.9209762212694304	0.9636491915278346
0.8411336995539748	0.4217518570295812	0.4634141922930782
0.8418848894356830	0.4209427955469330	0.9636545732144584
0.8411336988897279	0.9193817897489508	0.4634141900692315

0.8418848314970391	0.9209420333899279	0.9636545708891431
0.0000039545108316	0.0000079856686174	0.0891599605883953
0.9998982593883478	0.9997962516120297	0.5892982879257607
0.0000040232855069	0.4999959897652312	0.0891599912708718
0.9998978285871820	0.5001017696452817	0.5892982128993067
0.4999999740152633	0.0000000340007541	0.0892553363223358
0.4999999473983893	0.0000000012621947	0.5892719389664011
0.4999920181297591	0.4999960466148327	0.0891599617346142
0.5002036487053158	0.5001016312946204	0.5892982110069080
0.9996637267985642	0.9993274016802930	0.3386711272151253
0.9998780607997321	0.9997560903263104	0.8394681121220865
0.9996637649450902	0.5003362667429720	0.3386711692504066
0.9998780830352547	0.5001219215812344	0.8394679389059158
0.5000000106569672	0.9999999924185156	0.3392477981448671
0.5000000156378364	0.9999999941561893	0.8393301095901036
0.5006726395625557	0.5003362868143838	0.3386710873108082
0.5002439001919968	0.5001219166792807	0.8394680510239019

Cr:AlB4O6N optimised with HSE06

1.0000000000000000

10.0433139801000006	0.0000000000000000	0.0000000000000000
−5.0216581482000002	8.6977643763000003	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	16.4375457764000004

Cr	Al	B	O	N
1	15	64	96	16

Direct

0.1666666658537039	0.3333333227150561	0.5301600340549015
0.1666665864968238	0.3333334118510791	0.0303864135727494
0.1667762129517314	0.8333880932190922	0.0304017912401946
0.1666442343861902	0.8333221242886779	0.5303741450294197
0.6666119063427161	0.3332237808545102	0.0304017925746862
0.6666779185831189	0.3333557522071544	0.5303741270761719
0.6666118481503744	0.8333881478246496	0.0304017381312320
0.6666778558371220	0.8333221247752221	0.5303742081664851
0.3334147027815462	0.1665852663443204	0.2802130818674939
0.3334227162180881	0.1665772288814509	0.7806801990459604
0.3334147740075508	0.6668296442916102	0.2802130968963255
0.3334225007332563	0.6668450331332423	0.7806801466095905
0.8331703234775460	0.1665852012778899	0.2802130941376149
0.8331549051973255	0.1665775192450170	0.7806801544708648
0.8333333853765836	0.6666665908084610	0.2798659560664376
0.8333332781463412	0.6666667568597262	0.7806363666715228
0.4155804642340684	0.0844195240439660	0.1239922273827432
0.4157637199603670	0.0842361962191944	0.6241723539425621
0.4155941509746839	0.5844756844911387	0.1239073183108630
0.4170344654873617	0.5858992004542785	0.6247598917505002
0.9155243112157052	0.0844058420839531	0.1239073164465267
0.9141007015377625	0.0829655134110254	0.6247598775387218
0.9155447678828281	0.5844552348438796	0.1236633845959716
0.9154583471555924	0.5845416790986633	0.6242021150536843
0.4155940267623990	0.3311182287097907	0.1239072774797947
0.4170348369818413	0.3311347882412221	0.6247598397178109
0.4155804958923923	0.8311607961282164	0.1239921991986392
0.4157636878417748	0.8315270530062122	0.6241723956233329
0.9155243437341909	0.3311180902584425	0.1239072861940258
0.9141005071018711	0.3311349510543309	0.6247598056874750
0.9155446378267911	0.8310884069126558	0.1236632054368698
0.9154583369327298	0.8309165578262991	0.6242020819580176
0.1688817688473847	0.0844059687572383	0.1239072770901473
0.1688651941824091	0.0829653113262836	0.6247598575195283
0.1688819042323715	0.5844756470671797	0.1239072876879845
0.1688650793768218	0.5858995196613108	0.6247597965871918
0.6688392012931175	0.0844195018812499	0.1239921990301980
0.6684729180754019	0.0842363275697480	0.6241723888134345
0.6689115888312500	0.5844553645134738	0.1236632019762993
0.6690835005080515	0.5845417113565574	0.6242020794333882
0.0840291910242570	0.4159707881969510	0.3728623607811912
0.0844184754263537	0.4155815230937492	0.8740689357947389
0.0842526227145228	0.9151791207008415	0.3736782481414593
0.0844521310059747	0.9155448409269127	0.8742234657669243
0.5848208613101988	0.4157473489292016	0.3736782443878042
0.5844551504335556	0.4155478374543335	0.8742234784862788
0.5844237956640299	0.9155761704330629	0.3740594362841705
0.5844162361354108	0.9155837608515540	0.8742025452282007
0.0840291489688880	0.1680587571350856	0.3728622954290444
0.0844185995603013	0.1688374802882251	0.8740688389132174
0.0842525901932163	0.6690738378095133	0.3736782079652201
0.0844521662243523	0.6689077097972245	0.8742233650579081
0.5844238024934896	0.1688479560334457	0.3740593795537350

0.5844162807759830	0.1688327753582897	0.8742025586355808
0.5848209419575596	0.6690738722587781	0.3736782170057040
0.5844551409004595	0.6689076167951740	0.8742233712381733
0.3319412238457886	0.4159708234103547	0.3728622976363667
0.3311625192605518	0.4155813816793170	0.8740688400565091
0.3311520183333627	0.9155761825220239	0.3740593789214586
0.3311672013671654	0.9155837011392904	0.8742025511451104
0.8309261469414508	0.4157473887560101	0.3736782104581522
0.8310922933290712	0.4155478419599774	0.8742233645377908
0.8309260985635092	0.9151790384734042	0.3736782131535961
0.8310923687262317	0.9155448709180618	0.8742233769067269
0.9989092190632221	0.9978186517168766	0.4946671836960306
0.0000374490626527	0.0000751657047644	0.9949420740092023
0.9989092310709111	0.5010907879403703	0.4946671837226120
0.0000373088945764	0.4999626993290960	0.9949420821253057
0.4999999344024815	0.0000000418002131	0.4949722870752566
0.4999999227087528	0.0000000684303103	0.9950458225287022
0.5021813585307413	0.5010907524986550	0.4946671774309337
0.4999248280993385	0.4999625487913733	0.9949420767938477
0.9997533374971894	0.9995065196530533	0.2445315813129127
0.9995835652072813	0.9991667171259522	0.7453680165164087
0.9997533867001636	0.5002465890323649	0.2445316528369332
0.9995833813694404	0.5004166481398897	0.7453679640258457
0.499999978567615	0.9999999820623273	0.2449485585340767
0.5000000902503032	0.9999998782906729	0.7451449800248682
0.5004934627668902	0.5002466443278237	0.2445315788043203
0.5008333780520360	0.5004163578214147	0.7453680206773683
0.2543739382473689	0.2456260632089737	0.0970065996411265
0.2563372252654261	0.2436629058859552	0.5991377344328370
0.2544166596124953	0.7456912840644776	0.0970342237076736
0.2543872624375538	0.7465914738996204	0.5973496665076041
0.7543087212695596	0.2455833340287512	0.0970342232423533
0.7534085539442330	0.2456127549761362	0.5973496801031928
0.7543723726332345	0.7456276248376525	0.0967470613945522
0.7543811835402110	0.7456188586179380	0.5972265845665987
0.2544166070568465	0.0087250908831038	0.0970342494509211
0.2543873404140626	0.0077955950952600	0.5973495937471611
0.2543739829129592	0.5087477329883114	0.0970066133863412
0.2563371123358849	0.5126741650813145	0.5991373999526175
0.7543086221506812	0.0087251092308449	0.0970342534174833
0.7534086506587698	0.0077955759145780	0.5973497849665961
0.7543726438358505	0.5087440598721571	0.0967470773480130
0.7543811456026432	0.5087621494039993	0.5972266728215914
0.4912749035653121	0.2455833832680412	0.0970342494842740
0.4922043886285081	0.2456125347638647	0.5973495233365895
0.4912748798046920	0.7456913673216690	0.0970342572034255
0.4922044185322036	0.7465912880808574	0.5973498250812739
0.9912522691262211	0.2456260130540429	0.0970066049946681
0.9873258621403380	0.2436629029032247	0.5991374301411412
0.9912559739884657	0.7456273770951753	0.0967470576984937
0.9912378590946531	0.7456188754572608	0.5972266672874511
0.2456016997634549	0.2543982788616574	0.3463715496453474
0.2456200796520775	0.2543799323329949	0.8470905722626085
0.2456399949084513	0.7543556124642308	0.3470813125614640
0.2456932593925387	0.7544346686359802	0.8473207997909995
0.7456443589274500	0.2543599746868779	0.3470813085866666
0.7455653147850398	0.2543067451164518	0.8473208067887015
0.7456142079789103	0.7543857703097601	0.3463859656702653
0.7456059129408601	0.7543940751978724	0.8472585433863244
0.2456017370479842	0.4912038573735344	0.3463715996255630
0.2456199986078573	0.4912404830442014	0.8470908013837146

0.2456400248244961	0.9912848014618518	0.3470813482005184
0.2456933248962869	0.9912588845545045	0.8473209335616687
0.7456142026997696	0.4912287954851209	0.3463861146586495
0.7456059068511038	0.4912122430627477	0.8472585849732823
0.7456443798782502	0.9912847874004669	0.3470813912827992
0.7455652980659764	0.9912589551888971	0.8473207996804391
0.0087961106240968	0.2543982323334006	0.3463715970024595
0.0087595064088291	0.2543800137827859	0.8470908000319142
0.0087711610232333	0.7543857628984725	0.3463861100445413
0.0087877291665990	0.7543940570959577	0.8472586004740776
0.5087151813033799	0.2543599343273328	0.3470813384791143
0.5087410720690571	0.2543066292952219	0.8473209587200898
0.5087151847535765	0.7543555817317014	0.3470813978030094
0.5087410515772604	0.7544346651705780	0.8473207814122006
0.4211228564505944	0.0788771198793228	0.2134315677700016
0.4211288012451888	0.0788710678509119	0.7136309566616674
0.4213312380357763	0.5790592051124577	0.2132653019869366
0.4225277401624439	0.5798511893731657	0.7140605753399072
0.9209407788127422	0.0786687477622863	0.2132653036030945
0.9201484884170839	0.0774721130325986	0.7140605649021339
0.9209967906249190	0.5790032032372494	0.2129906196870408
0.9208612704121961	0.5791387482471464	0.7136548592764882
0.4213311337606811	0.3422718117011385	0.2132653008526404
0.4225294507678967	0.3426758577755393	0.7140605770817601
0.4211229183999237	0.8422456352563472	0.2134315659507635
0.4211288735153360	0.8422572130515817	0.7136310007908904
0.9209409586922419	0.3422717353184126	0.2132652762137965
0.9201477583958280	0.3426761339022732	0.7140605475145136
0.9209970781169474	0.8419929800207981	0.2129904555860946
0.9208611403175340	0.8417224605247142	0.7136548092422785
0.1577281768859251	0.0786688576384407	0.2132652955381360
0.1573240987913138	0.0774709703440806	0.7140605884761015
0.1577282420212214	0.5790590191904741	0.2132652662059868
0.1573238971854920	0.5798522570684383	0.7140605410053809
0.6577543324612449	0.0788770724676340	0.2134315568382448
0.6577427286601818	0.0788711602700900	0.7136310031450890
0.6580069906256938	0.5790028986099856	0.2129904572048744
0.6582776305345703	0.5791389846071411	0.7136548202664486
0.0768012662847539	0.4231987149989465	0.4615637870681653
0.0789274996357392	0.4210724987435697	0.9634762364948131
0.0780679738726207	0.9194807848670479	0.4632461116522322
0.0789569601368498	0.9211513734800008	0.9635859959370165
0.5805192073855636	0.4219320000515623	0.4632460971855537
0.5788486254840777	0.4210430290321625	0.9635859961959952
0.5788857132975238	0.9211142359862521	0.4634835708888119
0.5788720671441254	0.9211279027543711	0.9636092169865265
0.0768010531546608	0.1536027533650994	0.4615637036683395
0.0789277458325728	0.1578558250632440	0.9634761666272098
0.0780676641126163	0.6585874623145926	0.4632461080919867
0.0789568927838147	0.6578059858242398	0.9635859511757658
0.5788857544980601	0.1577717102115912	0.4634835236575512
0.5788720971287376	0.1577444784541839	0.9636092584897753
0.5805195375052818	0.6585874777534215	0.4632461135740584
0.5788484975668879	0.6578059071637838	0.9635859054789933
0.3463972404168629	0.4231989222108723	0.4615637119353195
0.3421441928191626	0.4210722682206693	0.9634761619225642
0.3422282562571652	0.9211142471117597	0.4634835321365429
0.3422555141094890	0.9211279139625645	0.9636092525297357
0.8414125364293952	0.4219323256912304	0.4632461014549492
0.8421940164841004	0.4210431040428801	0.9635859459285783
0.8414124947342145	0.9194804583156753	0.4632461118571456

0.8421940823861505	0.9211514944703580	0.9635859221915055
0.0000269699328825	0.0000536575701204	0.0890579046140232
0.9998817834659803	0.9997632987665028	0.5892617072351527
0.0000270886699312	0.4999729048230392	0.0890579133295049
0.9998816473477063	0.5001183392601831	0.5892617018664623
0.4999999984065511	0.9999999587043504	0.0892294906494726
0.5000001037410229	0.9999998771203877	0.5892789029083332
0.4999463398091777	0.4999730197832761	0.0890579006505803
0.5002367502504654	0.5001181937508790	0.5892617031990142
0.9996592939708506	0.9993188986546571	0.3385434569192967
0.9998908773142716	0.9997819488980184	0.8394588050405503
0.9996593452312865	0.5003406288979306	0.3385434771226485
0.9998907871327987	0.5001092101321802	0.8394588299911945
0.4999998844109612	0.0000000660696458	0.3391756806963642
0.4999999316682846	0.0000000556472699	0.8393526629177188
0.5006810787431348	0.5003406763472640	0.3385434656496003
0.5002180621088925	0.5001090804167987	0.8394588093330739

Cr:BeAl2O4 (Cs) optimised with r2SCAN

1.0000000000000000

13.2622833252000003 0.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000000 10.9387769698999993 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 9.3970136641999993

Cr Be Al O
1 24 47 96

Direct

0.4995684473099118	0.3750135000845631	0.7686163224336156
0.0220440632796581	0.1248705826270893	0.4072097418927711
0.0220183956247766	0.6251237449932887	0.4072071213731689
0.3551836669354955	0.1246045402374563	0.4069841826610769
0.3551794061910343	0.6253472130453162	0.4070110958975661
0.6888228646126748	0.1246995617371240	0.4071979815909046
0.6888138977629055	0.6252015685810832	0.4071796189457189
0.3104249841108881	0.3750498141680794	0.5917160755261790
0.3113037486804728	0.8750326243409106	0.5929325599624207
0.6453270858237374	0.3750180316593301	0.5903038087358681
0.6446755014495693	0.8750265471159366	0.5927846415012468
0.9780016910530662	0.3750158632081408	0.5930396894980916
0.9780565333980178	0.8750135676188080	0.5929505534725266
0.1443952262990535	0.1247284370406518	0.9073747311250884
0.1444061340679923	0.6252233407553263	0.9074037137231699
0.4777940828826246	0.1234333755278527	0.9078998898251953
0.4778145088579251	0.6265400905342133	0.9078675725675396
0.8114466589753206	0.1250588769642889	0.9073550888661188
0.8114591992984685	0.6249380191786003	0.9073525649325589
0.1885668490753289	0.3749952179878804	0.0926907537252433
0.1884767291537557	0.8749890764893067	0.0931182164967908
0.5223016095789816	0.3750021488369057	0.0943076326981895
0.5218758993779602	0.8750211179891139	0.0928020133096723
0.8557188864632721	0.3750433119040721	0.0933332750134426
0.8553257818626676	0.8750337082291608	0.0929664520246050
0.1650380465911283	0.3749601574707881	0.7725804799239668
0.1648693037929050	0.8749563768008599	0.7726961152854059
0.4982870124767018	0.8749667524426812	0.7726805325824344
0.8316098438512611	0.3749605495209707	0.7728055012331865
0.8318856423680927	0.8749884226283626	0.7724730496205439
0.3314076962536063	0.1246636073024661	0.7275965313339441
0.3314085214099833	0.6254305413733334	0.7276086361066660
0.6656904655716644	0.1239016695794106	0.7277418000006293
0.6656810457406976	0.6261698942036347	0.7277579036065447
0.9983792486190524	0.1250029425388490	0.7275889513436482
0.9983623610731343	0.6250566224119325	0.7275926153536645
0.1681948266044628	0.1248948345117071	0.2275482480805167
0.1682099913028097	0.6251321242353072	0.2275761531298741
0.5016222889757529	0.1244748143093517	0.2272996095368001
0.5016527152425212	0.6255558173948472	0.2273181513314384
0.8351886944301796	0.1249579726299856	0.2277156033651124
0.8351941072952300	0.6251212611154173	0.2277127385634188
0.0017735426432850	0.3749605493998729	0.2726607446517377
0.0016539352497631	0.8749823394696747	0.2725571007595207
0.3348048886229336	0.3749819698090064	0.2721967037560162
0.3348749372475979	0.8749536344163431	0.2727008465002569
0.6688803471035811	0.3749414116638405	0.2725746415207269
0.6683417427169118	0.8749594623155303	0.2725564426304317
0.1664521030043602	0.2499468587844902	0.4999096252401998
0.1666088227990912	0.7500625237851253	0.5000739489884864
0.4999785731243804	0.2494602217818169	0.4974887749053991
0.4999403609301396	0.7501113059071116	0.5001307752415585
0.8336096418885290	0.2498315174417840	0.5001492442573010

0.8334467820514107	0.7501090485850526	0.4999919265503650
0.0000309706914621	0.2499849377731778	0.0000845291997678
0.9999128169085978	0.7500275558336895	0.0001177974848829
0.3329221475541928	0.2494960524632788	0.0005234962638667
0.3330566155794159	0.7502739808645771	0.0002577842175810
0.6671532476165396	0.2496826947864719	0.0013222587212027
0.6666624891667610	0.7501021640483145	0.0001302353143018
0.1666175916635666	0.9999667026911183	0.5000712694420528
0.1664203518204417	0.5000907080977512	0.4999564516648576
0.4999465161274159	0.9998935256703305	0.5001172521151531
0.4999825144100853	0.5005258948717710	0.4974969517087118
0.8334910841001388	0.9998816018560674	0.4999818140100274
0.8335978412370793	0.5001290154104936	0.5001202373315863
0.9999031237260354	0.9999700444440052	0.0000825255782715
0.0000442069106796	0.5000083119010128	0.0000823922936490
0.3330090240753165	0.9996951560750205	0.0002198030018832
0.3329326954787533	0.5004565946498616	0.0004814113549685
0.6666565198093011	0.9999272645850255	0.0001266094026491
0.6671717911685846	0.5003343777979836	0.0013162162528886
0.2521092408797969	0.2577993823440252	0.6629847014892363
0.2521305288019136	0.7578519938235502	0.6634003611007060
0.5872148871170850	0.2554961927952775	0.6592448208750952
0.5856161346407234	0.7579651296058216	0.6634384159715978
0.9189540290910898	0.2577330720820967	0.6634646559291824
0.9189340944987379	0.7578363957518803	0.6634131083883190
0.0855449777936670	0.2421479637207469	0.8367791983488644
0.0853133205656391	0.7423071336297724	0.8367052580477008
0.4165943484202188	0.2381888832739278	0.8376128798386659
0.4187622250569163	0.7433868835426338	0.8372118834264839
0.7522527105641714	0.2421424675411501	0.8369741790210554
0.7523374724440970	0.7422903057388979	0.8368016562309322
0.0810448415976595	0.0076273315981581	0.3368208441805365
0.0810025963179513	0.5078304334098647	0.3367553581202145
0.4143614628892323	0.0073581715547917	0.3369173995311314
0.4142433342181562	0.5082705081558743	0.3356146110566556
0.7479072608248316	0.0075412654109641	0.3367088681465447
0.7480040380977542	0.5078191373827963	0.3371727976155299
0.2475888361054075	0.4922850582135823	0.1633392928705533
0.2475414014541641	0.9921763889803117	0.1635972077261556
0.5813574249969946	0.4927396823316457	0.1646097807512064
0.5811323003284059	0.9921288742081060	0.1631637564369441
0.9146203676573492	0.4924323022385622	0.1634170889152529
0.9144187018364107	0.9922690391207922	0.1633589252290335
0.0853175732180702	0.0076071583520729	0.8367251559385380
0.0855533993633841	0.5077295453020625	0.8368459768219054
0.4187397083028017	0.0065175068927630	0.8372696307311287
0.4165631750142467	0.5118245177611414	0.8375778966400986
0.7523234979975300	0.0076703346535467	0.8368195657955582
0.7522801500394962	0.5077930103437254	0.8370053428658792
0.0810408837055050	0.2421045676292408	0.3367124792844365
0.0810372014124923	0.7423249892615189	0.3367959300311156
0.4142158854738298	0.2416331147047188	0.3355748020260094
0.4143552371007431	0.7425401008865578	0.3368964866873583
0.7479970935199702	0.2420329894148381	0.3371764162511681
0.7478931928947077	0.7423307930629335	0.3366598487729959
0.2520862538282529	0.4923273186405694	0.6629963222392945
0.2521440839433353	0.9922601653389904	0.6633372017955566
0.5871984520915916	0.4945833152057233	0.6592505330596055
0.5856414757879520	0.9921298290861884	0.6633815261670222
0.9189494848882731	0.4923275806625753	0.6634204789617044
0.9189656203425471	0.9922496922133277	0.6633680338741357

0.2475633468344043	0.2577329318978059	0.1633430837929666
0.2475849251420570	0.7578516100934749	0.1636775684847649
0.5813764904093617	0.2572487030044073	0.1646053184532121
0.5811382453084519	0.7579628138036227	0.1632316252066843
0.9146232832477494	0.2577126140914672	0.1635012952032255
0.9144389920805125	0.7578402269478204	0.1634193425540502
0.0709631970713929	0.3749633736901714	0.0903563476033682
0.0708380077073727	0.8749779637182300	0.0903607377825395
0.4043521606665124	0.3749231874743870	0.0898998961666990
0.4041525107610511	0.8749545482158041	0.0906704641192775
0.7383208045232550	0.3749467248371019	0.0916861223184000
0.7376928036556052	0.8749832763914469	0.0903078858678228
0.2375260701191380	0.1249646510495808	0.4097577838340811
0.2375147134795412	0.6251230233597482	0.4098015684292307
0.5710532640351857	0.1243855765948041	0.4091038798590603
0.5710562248422519	0.6256745067043070	0.4091263157143956
0.9044545025258373	0.1249055339740295	0.4097455355799724
0.9044183661704110	0.6251658333819492	0.4097630177945817
0.2617393713959189	0.1242952840361440	0.9102711410684350
0.2617525187470946	0.6258094261286118	0.9103547361979594
0.5956815786327212	0.1251392443682988	0.9098068388294394
0.5957023696325834	0.6249665862135600	0.9097906920818986
0.9290175990660430	0.1250373620036669	0.9098431920668091
0.9290314160993347	0.6250323370190713	0.9098526041788375
0.0956071268634133	0.3749766183297538	0.5903476192374768
0.0956674499279160	0.8749822456731806	0.5903843997190776
0.4277085679828900	0.3749558127738268	0.5831976386192963
0.4289955298929442	0.8749828684890204	0.5903573383407945
0.7626856591976150	0.3749485611782006	0.5901550912879188
0.7624123017752211	0.8749723322940639	0.5903685236758136
0.2522809555375076	0.3750149516226031	0.4324305994088959
0.2528230504665316	0.8749551320733602	0.4333032441106752
0.5864357949544967	0.3749412697451788	0.4321402126714915
0.5862985722621303	0.8749550116640350	0.4331794448614161
0.9197280586443668	0.3749528982962076	0.4332182677598837
0.9196447523657127	0.8749572644748653	0.4331828434180025
0.0860690032876903	0.1249448472558186	0.0670314569867401
0.0860990931914856	0.6251193575704690	0.0670567399381881
0.4193673886770668	0.1243133887513679	0.0674806133749044
0.4194808550044229	0.6256963782258893	0.0674302880672570
0.7531017012217447	0.1248323546492855	0.0671243366616352
0.7531048445779476	0.6252770358362127	0.0671363876929121
0.0803673921834402	0.1249886682380037	0.5669365770955679
0.0803428880917068	0.6251388977878989	0.5669552527973494
0.4137762462290340	0.1250655858901197	0.5666326373272170
0.4137668059369375	0.6250266793427244	0.5666343925278952
0.7475137491769743	0.1245869621676903	0.5669710997957296
0.7474407908334726	0.6254411448945945	0.5669362142051355
0.2470355403276727	0.3749528253441312	0.9331783919192702
0.2467228894359295	0.8749369237983942	0.9334098100966983
0.5826526901405913	0.3750255897984616	0.9382033855370295
0.5805669150184229	0.8749672572023215	0.9331383339565917
0.9137868746715583	0.3749564186790408	0.9332955039979964
0.9136739076951272	0.8749611665819614	0.9332080879754656

Cr:BeAl2O4 (Cs) optimised with HSE06

1.0000000000000000

13.2453432082999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000000 10.9301490783999995 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 9.3886260985999996

Cr Be Al O
1 24 47 96

Direct

0.4995852572697952	0.3750008284612414	0.7685663261326340
0.0224688093235550	0.1248650262517090	0.4075412380257704
0.0224686623642037	0.6251328960494550	0.4075415443231600
0.3556151338934295	0.1246673287041614	0.4073870616128821
0.3556150354364542	0.6253305541988664	0.4073870412737070
0.6892564482201932	0.1247637456761296	0.4075525992590683
0.6892562513633931	0.6252343815728089	0.4075528132139010
0.3100506749967288	0.3750006062720183	0.5912949392817719
0.3108804455368407	0.8750006938687032	0.5926018712216898
0.6449500760133814	0.3750010013517818	0.5898453190411563
0.6442317258371937	0.8750007983418094	0.5924434287813307
0.9775797130249070	0.3750006891600951	0.5926624639828095
0.9776341412137414	0.8750006389899871	0.5925586113999080
0.1439603998038602	0.1247667640101180	0.9077522675101815
0.1439602822857988	0.6252315895155685	0.9077523054897487
0.4773282205407180	0.1234831579710460	0.9083002194851468
0.4773282181133677	0.6265160458754546	0.9083006771636193
0.8109872910238802	0.1250584660057655	0.9076674423172111
0.8109871327325293	0.6249396885138592	0.9076673361380840
0.1889991200307840	0.3750011531960948	0.0923387372590621
0.1888920343247421	0.8750007150916953	0.0927817852531042
0.5227597198473478	0.3750010339363882	0.0941188298146240
0.5223244298366606	0.8750008668318252	0.0924429522811440
0.8561682965155539	0.3750012604589869	0.0929640785357556
0.8557390850160366	0.8750007331964758	0.0925855851074612
0.1649463371918652	0.3750000170602764	0.7726143704862347
0.1647796994348955	0.8750000360444425	0.7727351292370999
0.4981578634112783	0.8749998756528256	0.7727457312977191
0.8315337382838923	0.3749999690804786	0.7728153653143091
0.8317750246517234	0.8749999427228239	0.7724720847036287
0.3313429571536262	0.1246679600203001	0.7276765033325465
0.3313428716313563	0.6253320842222508	0.7276765773658576
0.6655487139046268	0.1239537847203750	0.7276858981560234
0.6655486330815834	0.6260466945282903	0.7276861444478880
0.9982673246669318	0.1249698813140727	0.7275439865495188
0.9982672975438139	0.6250298358062369	0.7275440244800198
0.1682845215965613	0.1248794969937489	0.2275167585669003
0.1682843799046252	0.6251204754978238	0.2275167868283413
0.5017394809124232	0.1244472670813745	0.2272818142197757
0.5017394119886218	0.6255527598461135	0.2272819766868155
0.8352923448029788	0.1249148206436837	0.2276630880244032
0.8352922941486378	0.6250852975091884	0.2276633135598583
0.0018727932653750	0.3750001534916448	0.2726670945413440
0.0017485996154324	0.8749997582694273	0.2725594290532676
0.3348696727212856	0.3749999598549850	0.2721936991116171
0.4999942307826637	0.5005128112692487	0.4974241516982360
0.3349792050115836	0.8749998202885388	0.2727342036069024
0.6690451213768345	0.3749999854993417	0.2725566306134266
0.6684365741412666	0.8749997354780220	0.2725962980194745
0.1664290303578983	0.2499227793604391	0.4999395500543503
0.1666332212501234	0.7500428393947579	0.5000665542180074
0.4999943185941884	0.2494870288096524	0.4974241340391153
0.4999360378274763	0.7500998348198025	0.5001449834859589

0.8336322420767110	0.2498466468210943	0.5000988463542350
0.8334597332129984	0.7501166171412434	0.4999788532347333
0.0000250748026601	0.2499846801428703	0.0000632947265211
0.9998895239196761	0.7500262407827208	0.0000708016455658
0.3329565614112139	0.2495233786554304	0.0004815048366037
0.3330041924893224	0.7502837068517408	0.0002541070789846
0.6671257633897716	0.2497228466154901	0.0013193062602285
0.6666550480184518	0.7500758116194133	0.0000965886619647
0.1666333042818240	0.9999569634531273	0.5000665989475915
0.1664290363224912	0.5000769084434082	0.4999396682004094
0.4999362419224543	0.9998998845092587	0.5001448932353585
0.8334598100446673	0.9998830291186558	0.4999786178948505
0.8336321508669118	0.5001532210826697	0.5000988406352282
0.9998896938035341	0.9999734913689509	0.0000707812362972
0.0000249002928143	0.5000156324796839	0.000063339229895
0.3330042819797411	0.9997163688427956	0.0002539008920392
0.3329563870819952	0.5004770578450193	0.0004816209948530
0.6666550703567113	0.9999242083467842	0.0000964808010319
0.6671257622039474	0.5002772920999903	0.0013193367701181
0.2521240713118240	0.2579321487815363	0.6629773782585726
0.2521596947942268	0.7579480569026438	0.6633490127144763
0.5870787771664481	0.2559255301146786	0.6594308328557127
0.5856006669120331	0.7580447172469128	0.6633703682848000
0.9189366048385136	0.2578777077947595	0.6633819300874655
0.9189306620581640	0.7579571831648453	0.6633187346572433
0.0855329426191577	0.2420427920864750	0.8368338200448749
0.0853241958137954	0.7421752886138179	0.8367755371481894
0.4167635362496501	0.2382892541457289	0.8376689791286270
0.4187116278576939	0.7432160140267997	0.8372685608783785
0.7522309774116670	0.2420338506982204	0.8369965196684706
0.7522913776594873	0.7421192984105298	0.8368055836706048
0.0810637165268763	0.0078230433738553	0.3368214437514301
0.0810293967654502	0.5080227607006309	0.3367683385248727
0.4143712315386128	0.0076239859357121	0.3369647283296369
0.4142286692195406	0.5084279011834389	0.3356945218850477
0.7478832558792118	0.0077849433573621	0.3367410906316758
0.7480206460844004	0.5080710354937304	0.3371487552940383
0.2475837246188529	0.4921039092798257	0.1632939349280868
0.2475798932370201	0.9919973801549804	0.1635998295570064
0.5813755106071542	0.4925670949315888	0.1645691867232662
0.5811503435335077	0.9919234748881839	0.1631672584739524
0.9146240350595198	0.4921931008981933	0.1634314111462027
0.9144246723913753	0.9920541000134799	0.1633272263187562
0.0853244167962316	0.0078225867590436	0.8367758756713933
0.0855327318329912	0.5079553267185596	0.8368340384267238
0.4187118091706067	0.0067823386351367	0.8372684795635168
0.4167635200661725	0.5117117045737344	0.8376689760803323
0.7522915388702159	0.0078787705264631	0.8368059317168054
0.7522308967493737	0.5079642808012473	0.8369967319168006
0.0810291506456580	0.2419745684338149	0.3367669783159037
0.0810637220300086	0.7421746186855737	0.3368211275131139
0.4142283438742841	0.2415695186442184	0.3356940125508444
0.4143709848287388	0.7423733192991425	0.3369640685587485
0.7480207453015698	0.2419270723972904	0.3371486587931941
0.7478832147133097	0.7422129318615189	0.3367407919933125
0.2521240493127830	0.4920693636357313	0.6629773742224708
0.2521598021224296	0.9920535340697143	0.6633486739705241
0.5870784032489802	0.4940769961046515	0.6594307671555588
0.5856008552959272	0.9919571040759390	0.6633700195935031
0.9189367077351778	0.4921239800359196	0.6633815855788507
0.9189307455109824	0.9920444589568392	0.6633182613510481

0.2475838146490720	0.2578982595949322	0.1632939712414237
0.2475798464438452	0.7580043584511410	0.1636002318911882
0.5813755654675571	0.2574356661974774	0.1645702356617857
0.5811502661619422	0.7580783102038554	0.1631676087252572
0.9146237382893080	0.2578096515571001	0.1634312015662231
0.9144246652853573	0.7579477072274416	0.1633276499412488
0.0710981317965300	0.3750017756311832	0.0903574807915222
0.0709656625089475	0.8750006243697805	0.0903805587341991
0.4045272682416171	0.3750009656444261	0.0899895038091889
0.4043146980568834	0.8750006332803776	0.0906750016368561
0.7385159287559164	0.3750009219125947	0.0916955319724687
0.7378239759240657	0.8750006721413242	0.0903043159145444
0.2376722207455920	0.1249407008318505	0.4097317577315098
0.2376721890655081	0.6250574492904841	0.4097317318240405
0.5712200750230171	0.1243907791960338	0.4091210103871297
0.5712198120069606	0.6256078909055381	0.4091211006705697
0.9045928726037145	0.1248592529375085	0.4097319992034085
0.9045928688765087	0.6251390587527571	0.4097322527352436
0.2615948755981660	0.1243008313446182	0.9103144579055188
0.2615945522452102	0.6256980217606003	0.9103145514152493
0.5955132076800594	0.1250925104187006	0.9097727478689034
0.5955131564158811	0.6249061428761978	0.9097729381023738
0.9288557217416729	0.1250057191225412	0.9097655504168001
0.928855360615016	0.6249923746932059	0.9097655945401586
0.0954645806495816	0.3750006292578015	0.5903736165134675
0.0955424840186703	0.8750006350795401	0.5904087652798028
0.4277306734963355	0.3750005981330952	0.5836960429852125
0.4288573667557011	0.8750005878949136	0.5903926281434380
0.7625549484927181	0.3750007310073716	0.5901203875564542
0.7622567662409556	0.8750008230328485	0.5903865803888961
0.2524293950512723	0.3750005496930461	0.4326657075292753
0.2529782298173854	0.8750004258918856	0.4335362744837650
0.5865667432864031	0.3750007134606915	0.4322689458564035
0.5864208331312512	0.8750004591259889	0.4334202662643266
0.9198894792372090	0.3750004489242176	0.4334365823191360
0.9197861587455953	0.8750004318648664	0.4333958995271031
0.0861831110358656	0.1249225395207497	0.0668156959950290
0.0861831458283966	0.6250765561030015	0.0668156239450447
0.4195476335391757	0.1243221635763839	0.0672671027075352
0.4195470792630874	0.6256765421967895	0.0672678188825228
0.7532189218217569	0.1247741988454698	0.0668802637081029
0.7532189173350654	0.6252246292340535	0.0668801708265418
0.0802277233093578	0.1249246291708239	0.5667029541162101
0.0802275081262299	0.6250738589539806	0.5667031938490462
0.4136540779491452	0.1250631440783899	0.5664393372867833
0.4136537113701853	0.6249354294311635	0.5664390499103649
0.7473133158748769	0.1246301576031460	0.5667109960203024
0.7473131238980183	0.6253684490762528	0.5667110924748893
0.2469093682294395	0.3750008951388386	0.9334167471297012
0.2465529181898693	0.8750005090002870	0.9336765759232291
0.5824040723493178	0.3750008537949009	0.9382768214865442
0.5804271756777160	0.8750005148689798	0.9333645615098953
0.9136470030788844	0.3750006901717804	0.9335122644494553
0.9135079819994816	0.8750003321120389	0.9334205803774953

Cr:BeAl2O4 (Ci) optimised with r2SCAN

1.0000000000000000

13.2622833252000003 0.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000000 10.9387769698999993 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 9.3970136641999993

Cr Be Al O
1 24 47 96

Direct

0.5000000447833716	0.5000000687070086	0.4999997111891780
0.0220842027003358	0.1248942034742019	0.4072219149790219
0.0219437313447305	0.6250094876460857	0.4071490746258038
0.3553424009612223	0.1252619910533012	0.4073952715238701
0.3543668018596492	0.6272926085012264	0.4054866885729468
0.6888325374511208	0.1247714969015832	0.4070870382387486
0.6894655942470707	0.6255827289425284	0.4062014754087882
0.3105353888761589	0.3744180870519806	0.5937985034604402
0.3111674028164768	0.8752277794043580	0.5929133490309997
0.6456330234596319	0.3727078311227887	0.5945135926102254
0.6446576337871379	0.8747384992478987	0.5926043937611432
0.9780562085875167	0.3749907192358547	0.5928509347845763
0.9779151636316491	0.8751062734621021	0.5927786730223957
0.1446307217446867	0.1249329901962976	0.9072434696574173
0.1444702683465683	0.6250469154506902	0.9072227119687498
0.4780406968216993	0.1245501704588508	0.9077967124282631
0.4779552359533924	0.6251230037965554	0.9063981328711542
0.8114461735427364	0.1250382001669696	0.9073300388609719
0.8114885280123348	0.6248801187444130	0.9076533801532005
0.1885117462215880	0.3751194430654252	0.0923464411237550
0.1885534835386124	0.8749623070786909	0.0926708856138313
0.5220447136887577	0.3748766177592243	0.0936029205088144
0.5219592927581945	0.8754504409292078	0.0922039219890782
0.8555293372156461	0.3749526603291263	0.0927773715200580
0.8553695765669050	0.8750663150880310	0.0927557402176197
0.1647355036814592	0.3748231715850014	0.7726770280874147
0.1648585227372621	0.8750123868930203	0.7724655504913381
0.4984166669984023	0.3738687298563159	0.7741835833121765
0.4982662120579676	0.8750304690882026	0.7722760643366809
0.8319324051029622	0.3748442251686719	0.7727582959646585
0.8317796181782933	0.8750051609056330	0.7724112918650130
0.3316399776317311	0.1248397966337773	0.7277578716393400
0.3306470457058113	0.6256729738264444	0.7279856003978248
0.6652466425908170	0.1242165760426317	0.7277723312366224
0.6657241458962370	0.6252733873455169	0.7280114233451213
0.9983950595521621	0.1249165890172452	0.7275480533641426
0.9982933653621828	0.6250547826222553	0.7274809467347670
0.1682206461709151	0.1249946241348406	0.2275885719500376
0.1680675565842156	0.6251557538318098	0.2272418698831878
0.5017341076315923	0.1249695829322172	0.2277255819074853
0.5015834531265985	0.6261310136443815	0.2258173131486225
0.8351415132000533	0.1249870432360978	0.2275343856249514
0.8352643928426294	0.6251766978647273	0.2273230410580189
0.0017064507880405	0.3749447145934842	0.2725194960374587
0.0016053945325671	0.8750843641076969	0.2724535794193419
0.3342759138368023	0.3747261854508693	0.2719889780140387
0.3347532045859767	0.8757839429340561	0.2722276444336542
0.6693526438067092	0.3743263561044050	0.2720149549734220
0.6683608198150216	0.8751604216933275	0.2722413031415839
0.1665015270122530	0.2500122623469518	0.5000682043395048
0.1662604763289465	0.7503638408700664	0.4999091000500491
0.5002887314851623	0.2487416727288677	0.5011482133375911
0.4997116426024995	0.7512588539318990	0.4988512248120130

0.8337393690749297	0.2496362608090211	0.5000915960222213
0.8334985885766358	0.7499878038159882	0.4999325683580477
0.0000423747660753	0.2499266967250901	0.0000752609045296
0.9999580659898137	0.7500733913095589	0.9999255601949723
0.3333215037727776	0.2497993013867394	0.0002205439000792
0.3332601229086297	0.7502162512609258	0.9998282163634276
0.6667394834252504	0.2497831636539890	0.0001718520907683
0.6666780776709680	0.7501997695567282	0.9997796271788588
0.1666580894711744	0.0001537787128557	0.5001001068547328
0.1666059744503793	0.5002258311320849	0.4999534249162783
0.4999998603447296	0.0000002928587643	0.5000007029432789
0.8333420261612122	0.9998459218153007	0.4998992039916991
0.8333938405290252	0.4997742414865299	0.5000466538510223
0.0000000809110180	0.0000002252261378	0.0000010208338310
0.0000000320423163	0.4999997585305214	0.0000001629406508
0.3332289382931571	0.9999834651228307	0.9999855056265015
0.3333375818391576	0.5000042860787676	0.9997637276848503
0.6667714424783915	0.0000170853889757	0.0000132203977003
0.6666621161062398	0.4999945617233699	0.0002370081475716
0.2515594574894948	0.2573399979820249	0.6637085305928407
0.2514083431181732	0.7583901529500505	0.6637291928132183
0.5857874983825496	0.2561919690963003	0.6643546316948046
0.5854347146721237	0.7570556966972342	0.6624965311222784
0.9192215514462334	0.2575797596459773	0.6634121996542911
0.9188760489932550	0.7577499500613573	0.6632756670567496
0.0855116684348642	0.2421647064500716	0.8368705044847271
0.0853875782735495	0.7422494125615431	0.8366723680824485
0.4189042342009093	0.2415259375397674	0.8378649515384243
0.4186885317416328	0.7424816335769870	0.8363480595462441
0.7524114596730260	0.2421824435348411	0.8369910420852366
0.7523195080326101	0.7421445082832396	0.8365741181774308
0.0811537719287416	0.0077563112333811	0.3366711557654818
0.0809774977712771	0.5077189004930445	0.3367074964108414
0.4143216401739009	0.0081995303975017	0.3365355243905912
0.4117747333074320	0.5106819685811004	0.3313284518461311
0.7479267815659254	0.0075362033629055	0.3366203538104940
0.7479507014844474	0.5075975970554777	0.3366785346459710
0.2471980068695419	0.4923551252355381	0.1625059415848022
0.2476470306497647	0.9922911275775843	0.1633213008690471
0.5810783759739494	0.4921984629206933	0.1636996149244916
0.5811553547032092	0.9924204848937784	0.1630554883833686
0.9144579147347967	0.4923277000615907	0.1631997138290361
0.9144941480185971	0.9922782756820813	0.1632717562043441
0.0855052161784519	0.0077208337099315	0.8367293088491663
0.0855414759978278	0.5076724000131687	0.8368004492678373
0.4188453895886611	0.0075788698245340	0.8369433822650879
0.4189215291608731	0.5078013825663561	0.8363014750574589
0.7523511397181089	0.0077095199150521	0.8366774921849176
0.7528018459583942	0.5076446802304477	0.8374941531398314
0.0811238011356329	0.2422499599074644	0.3367239584934322
0.0807781732957860	0.7424229074272318	0.3365902768125387
0.4145648225375432	0.2429431106780882	0.3375029537520512
0.4142105092308506	0.7438071453648489	0.33564444961040968
0.7485915206979931	0.2416104850230953	0.3362711398704828
0.7484414573259842	0.7426614959861390	0.3362922277155435
0.2520489291618684	0.4924029502364342	0.6633213768696141
0.2520734978199450	0.9924646890343999	0.6633777941870502
0.5882261596389314	0.4893181241017719	0.6686712856245800
0.5856772344337485	0.9918018174348252	0.6634643809159224
0.9190221450049535	0.4922814053617383	0.6632922433292201
0.9188460120501778	0.9922437833271557	0.6633291011652002

0.2476811307109507	0.2578549906988942	0.1634252969477896
0.2475886568456195	0.7578175905759487	0.1630089005072865
0.5813111040920274	0.2575153217848900	0.1636527262606123
0.5810962324377971	0.7584731560028216	0.1621343687492766
0.9146121507087188	0.2577505566960991	0.1633284154362640
0.9144889244268414	0.7578358627098811	0.1631285184833343
0.0709235417908327	0.3749349146955310	0.0902129439069655
0.0709172289526467	0.8750076013612101	0.0901773969129099
0.4042226822265030	0.3748705007177274	0.0901646387024276
0.4042258628640581	0.8751757715263689	0.0899228345798611
0.7378297424978481	0.3748520089259165	0.0904002003870841
0.7377302134815861	0.8750738630389059	0.0900193660275920
0.2376287990357127	0.1252239886994051	0.4097762011410961
0.2369097492177524	0.6256037137983500	0.4092538328452727
0.5710609546486460	0.1244327738048299	0.4097589239749987
0.5722364019564339	0.6301860555646999	0.4049057380017624
0.9045290484906588	0.1247429940033285	0.4098112279805702
0.9043146229557100	0.6249243479540774	0.4097402239571925
0.2622701064345217	0.1249255639791877	0.9099796076931046
0.2621702839926904	0.6251462163145373	0.9095976835385845
0.5957742549478949	0.1248258981703308	0.9100749676808950
0.5957780388759890	0.6251285310766125	0.9098354365153631
0.9290823547635239	0.1249940382380818	0.9098231223593288
0.9290758593466797	0.6250646931955752	0.9097865583258778
0.0956856069750073	0.3750755675056889	0.5902602138683216
0.0954714347394953	0.8752554097500178	0.5901878661623209
0.4277627884252058	0.3698144523674526	0.5950912625784511
0.4289390100619156	0.8755683804738237	0.5902385946107995
0.7630900183212738	0.3743966396893837	0.5907460638020046
0.7623714950539915	0.8747764746031395	0.5902234300405282
0.2530092037429650	0.3751503245163886	0.4333641591981006
0.2527979635283353	0.8751822527143863	0.4331603661502461
0.5894858648743607	0.3700953100267921	0.4337381390135033
0.5863267172630938	0.8757638261591494	0.4328860244072535
0.9197068055942593	0.3748292555378510	0.4330967650093464
0.9196239946143540	0.8749676866545323	0.4331217613919292
0.0862766539006139	0.1250001069832612	0.0669496520990799
0.0861041677720128	0.6251194136421588	0.0667941825824549
0.4194646480080717	0.1248414917950730	0.0674507671571856
0.4195394393198326	0.6253887069895672	0.0658479126684329
0.7530774524748782	0.1249563431830607	0.0669262482783378
0.7529100110848335	0.6251924216123581	0.0670586322005886
0.0803760136490787	0.1250336312267013	0.5668777089148175
0.0802934097448716	0.6251702891524745	0.5669044820899327
0.4136752835770200	0.1242362960624143	0.5671129744346565
0.4105140295058297	0.6299053253656086	0.5662622649042368
0.7472024501497162	0.1248155802150783	0.5668384938833622
0.7469902405902458	0.6248500858111283	0.5666360005033979
0.2470898743899273	0.3748068415025280	0.9329423176893611
0.2469223223040457	0.8750435268753282	0.9330745531279887
0.5804601327677728	0.3746111498684671	0.9341524209674928
0.5805364525076193	0.8751598398151386	0.9325509703243300
0.9138960212754468	0.3748808375147947	0.9332059518478899
0.9137239719321842	0.8749995210372934	0.9330503818327517

Cr:BeAl2O4 (Ci) optimised with HSE06

1.0000000000000000

13.2453432082999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000000 10.9301490783999995 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 9.3886260985999996

Cr Be Al O
1 24 47 96

Direct

0.5000000602767116	0.4999999138500471	0.5000000678378882
0.0225061239720716	0.1248784306570769	0.4075250533470509
0.0223674129497695	0.6249645008449392	0.4075404448080562
0.3557619975330013	0.1252868017275119	0.4076547148009766
0.3547642176131305	0.6273153417057458	0.4058443828317806
0.6892835998677214	0.1248272187407480	0.4074307163843969
0.6897918971704726	0.6257924465983891	0.4065157518435925
0.3102082070074275	0.3742075429818712	0.5934842472386279
0.3107164874024306	0.8751727915132577	0.5925692875813411
0.6452358483225709	0.3726846408711140	0.5941556231329344
0.6442380680934860	0.8747132130702511	0.5923452926603758
0.9776324505808773	0.3750354822703272	0.5924595591889954
0.9774937363525069	0.8751215789982680	0.5924749573294932
0.1441848493041391	0.1249363453027286	0.9075806369408568
0.1440647951426968	0.6250508288877583	0.9076157843298773
0.4775994640527585	0.1245756085394945	0.9081025003160548
0.4775402224582308	0.6251468400476412	0.9067768841730768
0.8110139183262604	0.1250688903917165	0.9076233438873444
0.8110445347147675	0.6249705940814820	0.9079838432082639
0.1889553804181361	0.3750293899353281	0.0920161493442677
0.1889860021377245	0.8749311146294190	0.0923766542084010
0.5224599144273157	0.3748531414167360	0.0932231109331383
0.5224006795159113	0.8754244009819061	0.0918975007935927
0.8559351447946710	0.3749491512655538	0.0923842106915345
0.8558150832070837	0.8750636689465736	0.0924193610156649
0.1646540994472332	0.3748494258760289	0.7726963236754543
0.1647579544559576	0.8750354774687068	0.7725263144810981
0.4983257221966682	0.3738631003524659	0.7741405127593382
0.4981647590646219	0.8750493225716482	0.7723403330825889
0.8318388827013976	0.3749322840997493	0.7727554005185979
0.8316940643661326	0.8750575638663065	0.7724745657264762
0.3315119080344147	0.1247569254386391	0.7277037659375907
0.3305947263968392	0.6256355304081325	0.7279009838625399
0.6651614254983329	0.1241711672300596	0.7277106195108445
0.6655857264074214	0.6251820257539649	0.7279594518517243
0.9982854307687816	0.1249136169038039	0.7274753051132379
0.9982049936800692	0.6250375491854356	0.7274636265195724
0.1683058369249295	0.1249424527689200	0.2275254323386093
0.1681610284706494	0.6250676980979719	0.2272445999897243
0.5018354297001437	0.1249506874235564	0.2276596750344737
0.5016744453648769	0.6261368854291405	0.2258594539026433
0.8352419490623006	0.1249645358211282	0.2274736814307943
0.8353458075250728	0.6251505578375145	0.2273036736375289
0.0017948201815159	0.3749624297815757	0.2725363732385304
0.0017143865422611	0.8750863958475463	0.2725247031259244
0.3344143778762358	0.3748179751926486	0.2720405711786640
0.3348386784360216	0.8758288456911529	0.2722893850126269
0.6694053701482687	0.3743644460737556	0.2720989989053209
0.6684881869624633	0.8752430972900527	0.2722962270085532
0.1664960829606841	0.2499637388649774	0.5000460919355874
0.1662387770068392	0.7503103027770024	0.4999444047423083
0.5003398494963491	0.2486377893685372	0.5011366812261429
0.4996603196318858	0.7513622636546842	0.4988633411017531

0.8337611338344644	0.2496896890413822	0.5000555988805431
0.8335038233952830	0.7500362576800157	0.4999539153612247
0.0000268650900139	0.2499275411370334	0.0000343654543258
0.9999729410701761	0.7500724613953125	0.9999656303167157
0.3333172735621517	0.2497802646667040	0.0001914721133573
0.3332596807958694	0.7501970784485863	0.9998937391245164
0.6667404187698267	0.2498029145060841	0.0001062566961991
0.6666828189070770	0.7502197299873075	0.9998085201246170
0.1666481385676448	0.0001178481886583	0.5000956157917926
0.1666681002760768	0.5001484860727814	0.4999761418305511
0.5000000998866909	0.0000000162702420	0.5000000050989755
0.8333517665506420	0.9998821855936910	0.4999043890896857
0.8333318113791108	0.4998514853807379	0.5000238672996105
0.9999999018044434	0.0000000084140339	0.9999999985649239
0.9999999031017452	0.4999999792656382	0.9999999978704324
0.333222500706123	0.9999730150864963	0.9999699482881823
0.3333591702687073	0.4999703000055433	0.9997558635801269
0.6667778452470046	0.0000270185212443	0.0000300416706978
0.6666409301239327	0.5000296729026914	0.0002441282574566
0.2515693645812362	0.2573911031351486	0.6636373029888105
0.2514537429175974	0.7584746386655397	0.6636671332247204
0.5858290140056752	0.2563026863645703	0.6642981488432298
0.5853860032395843	0.7572444722578027	0.6625512761911310
0.9192297771949853	0.2577723373984853	0.6632888580615770
0.9188748137757869	0.7579078602708691	0.6632390894161517
0.0854965315043330	0.2420392239709557	0.8369075969290023
0.0854250016601270	0.7421108111600461	0.8368099542980261
0.4188714480290088	0.2414536156355851	0.8378432240660203
0.4186938816551873	0.7423480629742656	0.8364700724156648
0.7523967084998660	0.2420874477260355	0.8370023435398437
0.7523168043816781	0.7420668790449980	0.8366840488970411
0.0811662198169429	0.0079243014187469	0.3366908673137416
0.0810026817093004	0.5078592068100178	0.3367549120315445
0.4143548815407030	0.0083970189335147	0.3365351284110289
0.4119194352868760	0.5107626012981541	0.3319069542793258
0.7479314020368619	0.0077912381544891	0.3366406357839082
0.7478633353242756	0.5079140028435845	0.3367002374942558
0.2472657274638195	0.4920612380505887	0.1625768944237365
0.2476629476292160	0.9920781984602485	0.1633037647318432
0.5810588746596324	0.4919933814626276	0.1636687636874754
0.5811821637190633	0.9921999096268266	0.1630824402591529
0.9144569039596036	0.4921125768569752	0.1631706062560099
0.9145118688695320	0.9920835462378719	0.1632377087375403
0.0854882892499020	0.0079164340738558	0.8367622594117776
0.0855432382218666	0.5078874168328369	0.8368293862313934
0.4188176835935806	0.0078001042019622	0.8369175761452468
0.4189409764953069	0.5080066389720557	0.8363312694225726
0.7523370625606987	0.0079217850796667	0.8366962376889688
0.7527342803751935	0.5079387527585268	0.8374231051120802
0.0811253334441204	0.2420921119767314	0.3367609266448923
0.0807703710463059	0.7422276411932174	0.3367111606122322
0.4146138376971606	0.2427555214167114	0.3374487002729509
0.4141708505701658	0.7436973459511123	0.3357018248713572
0.7485462452009273	0.2415253787354885	0.3363328586376042
0.7484306304762001	0.7426088755568117	0.3363626913361557
0.2521366542105667	0.4920859976488074	0.6632997823646249
0.2520685869869084	0.9922087562120083	0.6633593617431828
0.5880804584563677	0.4892374177696368	0.6680930159918717
0.5856449781721409	0.9916029598183371	0.6634648607325531
0.9189974677102128	0.4921408195874761	0.6632451133929251
0.9188339188851558	0.9920757030775604	0.6633091492549070

0.2476831775900195	0.2579331195226828	0.1633159474880443
0.2476032797562766	0.7579125684256880	0.1629976367957156
0.5813059751016709	0.2576519165205582	0.1635299460370163
0.5811284082394792	0.7585463642728314	0.1621568020990125
0.9145751513255931	0.2578892003049091	0.1631900354786850
0.9145036228552001	0.7579607841951912	0.1630923880045927
0.0710688219995745	0.3749603129961443	0.0902518857996171
0.0710659111253662	0.8750425708560599	0.0902726808868124
0.4043705014167429	0.3748972416095810	0.0902483711479434
0.4043680020400870	0.8752288271374979	0.0899788272729936
0.7379454885401060	0.3749303793552556	0.0903740979878052
0.7378856895042532	0.8751293648863552	0.0900757508186842
0.2377692694251508	0.1251365855411137	0.4096798235508032
0.2370378036022700	0.6254983268219689	0.4092372629572480
0.5712271855846893	0.1243632182595391	0.4097351194295413
0.5722104298412916	0.6299796986419182	0.4052085411971973
0.9046683372332964	0.1247385478831973	0.4097272309465012
0.9044373318198495	0.6249175327860925	0.4097185877582632
0.2621142962589929	0.1248706340335630	0.9099242368289424
0.2620544884271325	0.6250696322125933	0.9096259084385849
0.5956318062317720	0.1247711769694604	0.9100211609072346
0.5956293187622563	0.6251027440126151	0.9097516177160827
0.9289342966522867	0.1249574231444299	0.9097273236380659
0.9289313823850378	0.6250396929860216	0.9097481088013950
0.0955628438355660	0.3750824619749409	0.5902814031622938
0.0953318359384596	0.8752614581619511	0.5902727806022554
0.4277894153676129	0.3700203469253722	0.5947914309312097
0.4287726146188504	0.8756368005810629	0.5902648897466349
0.7629622196629171	0.3745016945080408	0.5907627303348661
0.7622307499979826	0.8748634018758921	0.5903201716611122
0.2532175434549018	0.3750802633775692	0.4336471037852974
0.2529031339831604	0.8751803641566056	0.4334002650875775
0.5894709161507308	0.3703423773195524	0.4339836561600023
0.5865057229734418	0.8757753958388150	0.4331801725031994
0.9198361075695161	0.3749364455014543	0.4333210961784530
0.9197765846702310	0.8750495224327324	0.4333917123728526
0.0863906428548376	0.1249579292104883	0.0667040137120907
0.0862335104776477	0.6250517021333550	0.0666207741972116
0.4196221022214530	0.1247909059618948	0.0671541253902177
0.4197088046126467	0.6253096268003802	0.0656808824990378
0.7532282483005019	0.1249282484462384	0.0666505105529254
0.7530205476191938	0.6251759695805319	0.0668369153809252
0.0802235669099147	0.1249504637537981	0.5666082585882677
0.0801640332721192	0.6250635567014484	0.5666788652279351
0.4134941319025032	0.1242245996942302	0.5668198534809292
0.4105289480310432	0.6296576989884244	0.5660163802763520
0.7470968626440850	0.1248196503740857	0.5665997458742567
0.7467824333434550	0.6249197314414445	0.5663528999311183
0.2469794547155288	0.3748240216306655	0.9331630889816154
0.2467717558049713	0.8750717500139800	0.9333494869735617
0.5802910496473999	0.3746903754629187	0.9343190762754432
0.5803777412365321	0.8752090876340475	0.9328458425992281
0.9137666377863454	0.3749482984271140	0.9333792502256628
0.9136095082125451	0.8750420521997526	0.9332960120828275