

Supplementary Materials

Table S1. Atomic Mulliken charges populations of pure and Ce-doped BaTiO₃

Compound	Spilling	Species	s	p	d	f	Total	Mulliken charge
BaTiO ₃	0.15	Ba	2.06	5.82	0.68	0.00	8.56	1.44
		Ti	2.38	6.80	2.08	0.00	11.26	0.74
		O1	1.84	4.86	0.00	0.00	6.70	-0.70
		O2	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O3	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
Ba _{0.875} Ce _{0.125} TiO ₃	0.15	Ba1	2.06	5.80	0.70	0.00	8.56	1.44
		Ba2	2.06	5.80	0.70	0.00	8.56	1.44
		Ba3	2.08	5.82	0.68	0.00	8.58	1.42
		Ba4	2.06	5.80	0.70	0.00	8.56	1.44
		Ba5	2.08	5.82	0.68	0.00	8.58	1.42
		Ba6	2.08	5.82	0.68	0.00	8.58	1.42
		Ba7	2.08	5.82	0.70	0.00	8.60	1.40
		Ti1	2.38	6.80	2.08	0.00	11.26	0.74
		Ti2	2.38	6.80	2.08	0.00	11.26	0.74
		Ti3	2.38	6.80	2.08	0.00	11.26	0.74
		Ti4	2.38	6.80	2.08	0.00	11.26	0.74
		Ti5	2.38	6.80	2.08	0.00	11.26	0.74
		Ti6	2.38	6.80	2.08	0.00	11.26	0.74
		Ti7	2.38	6.80	2.08	0.00	11.26	0.74
		Ti8	2.38	6.80	2.08	0.00	11.26	0.74
		Ce	2.20	6.05	1.10	1.10	10.45	1.55
		O1	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O2	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O3	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O4	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O5	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O6	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O7	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O8	1.84	4.89	0.00	0.00	6.73	-0.73
		O9	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O10	1.84	4.89	0.00	0.00	6.73	-0.73
		O11	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O12	1.84	4.89	0.00	0.00	6.73	-0.73
		O13	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O14	1.84	4.89	0.00	0.00	6.73	-0.73
		O15	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O16	1.84	4.89	0.00	0.00	6.73	-0.73
		O17	1.84	4.89	0.00	0.00	6.73	-0.73
		O18	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O19	1.84	4.89	0.00	0.00	6.73	-0.73
		O20	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O21	1.84	4.89	0.00	0.00	6.73	-0.73
		O22	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O23	1.84	4.89	0.00	0.00	6.73	-0.73

		O24	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		Ba1	2.06	5.88	0.69	0.00	8.63	1.37
		Ba2	2.06	5.88	0.67	0.00	8.61	1.39
		Ba3	2.06	5.88	0.69	0.00	8.63	1.37
		Ba4	2.06	5.88	0.67	0.00	8.61	1.39
		Ba5	2.06	5.88	0.69	0.00	8.63	1.37
		Ba6	2.06	5.88	0.67	0.00	8.61	1.39
		Ba7	2.06	5.88	0.68	0.00	8.62	1.38
		Ba8	2.06	5.88	0.66	0.00	8.60	1.40
		Ti1	2.36	6.78	2.08	0.00	11.22	0.78
		Ti2	2.36	6.78	2.08	0.00	11.22	0.78
		Ti3	2.36	6.78	2.08	0.00	11.22	0.78
		Ti4	2.36	6.78	2.08	0.00	11.22	0.78
		Ti5	2.40	6.78	2.02	0.00	11.20	0.80
		Ti6	2.38	6.80	2.08	0.00	11.26	0.74
		Ti7	2.38	6.78	2.08	0.00	11.24	0.76
		Ce	2.26	6.22	1.78	0.82	11.08	0.92
		O1	1.86	4.84	0.00	0.00	6.70	-0.70
		O2	1.86	4.86	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O3	1.86	4.84	0.00	0.00	6.70	-0.70
		O4	1.86	4.86	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O5	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O6	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O7	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O8	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O9	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O10	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O11	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O12	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O13	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O14	1.84	4.86	0.00	0.00	6.70	-0.70
		O15	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O16	1.84	4.86	0.00	0.00	6.70	-0.70
		O17	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O18	1.84	4.86	0.00	0.00	6.70	-0.70
		O19	1.84	4.90	0.00	0.00	6.74	-0.74
		O20	1.84	4.86	0.00	0.00	6.70	-0.70
		O21	1.84	4.88	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O22	1.85	4.88	0.00	0.00	6.73	-0.73
		O23	1.86	4.86	0.00	0.00	6.72	-0.72
		O24	1.85	4.86	0.00	0.00	6.71	-0.71

Table S2. Bond overlap populations of pure and Ce-doped BaTiO₃

Compound	Bond	Population
BaTiO ₃	Ba1--O2	-0.14
	Ba1--O3	-0.14
	Ba1--O1	-0.07
	Ti1--O1	1.01
	Ti1--O2	1.15
	Ti1--O3	1.15
Ba _{0.875} Ce _{0.125} TiO ₃	O15--Ba1	-0.14
	O13--Ba1	-0.14
	O11--Ba1	-0.14
	O9--Ba1	-0.14
	O14--Ba4	-0.13
	O12--Ba2	-0.13
	O10--Ba2	-0.13
	O16--Ba4	-0.13
	O13--Ba4	-0.12
	O11--Ba2	-0.12
	O9--Ba2	-0.12
	O15--Ba4	-0.12
	O6--Ba4	-0.12
	O2--Ba4	-0.12
	O8--Ba4	-0.12
	O8--Ba2	-0.12
	O4--Ba4	-0.12
	O2--Ba2	-0.12
	O6--Ba2	-0.12
	O4--Ba2	-0.12
	O17--Ba7	-0.12
	O23--Ba7	-0.12
	O21--Ba7	-0.12
	O19--Ba7	-0.12
	O13--Ba5	-0.12
	O11--Ba3	-0.12
	O9--Ba3	-0.12
	O15--Ba5	-0.12
	O16--Ba1	-0.11
	O14--Ba1	-0.11
	O12--Ba1	-0.11
	O10--Ba1	-0.11
	O19--Ba3	-0.11
	O23--Ba5	-0.11
	O21--Ba5	-0.11
	O17--Ba3	-0.11
	O6--Ba6	-0.11
	O2--Ba6	-0.11
	O8--Ba6	-0.11
	O4--Ba6	-0.11
	O5--Ba7	-0.1

	O1--Ba7	-0.1
	O7--Ba7	-0.1
	O3--Ba7	-0.1
	O24--Ba4	-0.1
	O22--Ba4	-0.1
	O20--Ba2	-0.1
	O18--Ba2	-0.1
	O18--Ba6	-0.1
	O24--Ba6	-0.1
	O22--Ba6	-0.1
	O20--Ba6	-0.1
	O19--Ba2	-0.09
	O23--Ba4	-0.09
	O21--Ba4	-0.09
	O17--Ba2	-0.09
	O17--Ba6	-0.09
	O23--Ba6	-0.09
	O21--Ba6	-0.09
	O19--Ba6	-0.09
	O7--Ba1	-0.09
	O5--Ba1	-0.09
	O3--Ba1	-0.09
	O1--Ba1	-0.09
	O5--Ba5	-0.09
	O1--Ba5	-0.09
	O7--Ba3	-0.09
	O5--Ba3	-0.09
	O3--Ba3	-0.09
	O1--Ba3	-0.09
	O7--Ba5	-0.09
	O3--Ba5	-0.09
	O14--Ba5	-0.09
	O12--Ba3	-0.09
	O10--Ba3	-0.09
	O16--Ba5	-0.09
	O24--Ba5	-0.08
	O22--Ba5	-0.08
	O20--Ba3	-0.08
	O18--Ba3	-0.08
	O18--Ba7	-0.08
	O24--Ba7	-0.08
	O22--Ba7	-0.08
	O20--Ba7	-0.08
	O16--Ce1	-0.03
	O14--Ce1	-0.03
	O12--Ce1	-0.03
	O10--Ce1	-0.03
	O8--Ti4	0
	O8--Ti2	0

	O6--Ti2	0
	O4--Ti8	0
	O4--Ti6	0
	O2--Ti8	0
	O2--Ti6	0
	O6--Ti4	0
	O23--Ti8	0
	O23--Ti2	0
	O21--Ti6	0
	O19--Ti8	0
	O19--Ti4	0
	O17--Ti6	0
	O17--Ti2	0
	O21--Ti4	0
	O16--Ti2	0
	O12--Ti2	0
	O16--Ti6	0
	O14--Ti8	0
	O14--Ti4	0
	O12--Ti8	0
	O10--Ti6	0
	O10--Ti4	0
	O7--Ti3	0
	O5--Ti3	0
	O5--Ti1	0
	O3--Ti7	0
	O3--Ti5	0
	O7--Ti1	0
	O1--Ti7	0
	O1--Ti5	0
	O22--Ti5	0
	O24--Ti7	0
	O24--Ti1	0
	O22--Ti3	0
	O20--Ti7	0
	O20--Ti3	0
	O18--Ti5	0
	O18--Ti1	0
	O16--Ti7	0
	O16--Ti3	0
	O14--Ti5	0
	O14--Ti1	0
	O12--Ti5	0
	O12--Ti3	0
	O10--Ti7	0
	O10--Ti1	0
	O24--Ti6	0
	O24--Ti4	0
	O22--Ti2	0

	O20--Ti6	0
	O20--Ti2	0
	O18--Ti8	0
	O18--Ti4	0
	O22--Ti8	0
	O19--Ti5	0
	O19--Ti1	0
	O23--Ti5	0
	O23--Ti3	0
	O21--Ti7	0
	O21--Ti1	0
	O17--Ti7	0
	O17--Ti3	0
	O15--Ti2	0
	O13--Ti8	0
	O11--Ti2	0
	O9--Ti6	0
	O9--Ti4	0
	O15--Ti6	0
	O13--Ti4	0
	O11--Ti8	0
	O8--Ti6	0
	O6--Ti8	0
	O4--Ti2	0
	O2--Ti4	0
	O23--Ti6	0
	O23--Ti4	0
	O21--Ti2	0
	O19--Ti6	0
	O19--Ti2	0
	O17--Ti8	0
	O17--Ti4	0
	O21--Ti8	0
	O8--Ti5	0
	O6--Ti7	0
	O4--Ti1	0
	O2--Ti3	0
	O7--Ti5	0
	O5--Ti7	0
	O3--Ti1	0
	O1--Ti3	0
	O16--Ti5	0
	O16--Ti1	0
	O14--Ti7	0
	O14--Ti3	0
	O12--Ti7	0
	O12--Ti1	0
	O10--Ti5	0
	O10--Ti3	0

	O22--Ti1	0
	O24--Ti5	0
	O24--Ti3	0
	O22--Ti7	0
	O20--Ti5	0
	O20--Ti1	0
	O18--Ti7	0
	O18--Ti3	0
	O7--Ti6	0
	O5--Ti8	0
	O3--Ti2	0
	O1--Ti4	0
	O15--Ti8	0.01
	O15--Ti4	0.01
	O13--Ti6	0.01
	O13--Ti2	0.01
	O11--Ti6	0.01
	O11--Ti4	0.01
	O9--Ti8	0.01
	O9--Ti2	0.01
	O15--Ti5	0.01
	O13--Ti7	0.01
	O13--Ti3	0.01
	O11--Ti1	0.01
	O9--Ti3	0.01
	O15--Ti1	0.01
	O11--Ti7	0.01
	O9--Ti5	0.01
	O8--Ti3	0.01
	O8--Ti1	0.01
	O6--Ti3	0.01
	O6--Ti1	0.01
	O4--Ti7	0.01
	O4--Ti5	0.01
	O2--Ti7	0.01
	O2--Ti5	0.01
	O7--Ti4	0.01
	O7--Ti2	0.01
	O5--Ti4	0.01
	O5--Ti2	0.01
	O3--Ti8	0.01
	O3--Ti6	0.01
	O1--Ti8	0.01
	O1--Ti6	0.01
	O8--Ce1	0.04
	O6--Ce1	0.04
	O4--Ce1	0.04
	O2--Ce1	0.04
	O7--Ce1	0.06

	O5--Ce1	0.06
	O3--Ce1	0.06
	O1--Ce1	0.06
	O8--Ba1	0.06
	O6--Ba1	0.06
	O4--Ba1	0.06
	O2--Ba1	0.06
	O21--Ce1	0.06
	O19--Ce1	0.06
	O17--Ce1	0.06
	O23--Ce1	0.06
	O9--Ba4	0.06
	O13--Ba2	0.06
	O11--Ba4	0.06
	O15--Ba2	0.06
	O12--Ba4	0.06
	O10--Ba4	0.06
	O16--Ba2	0.06
	O14--Ba2	0.06
	O14--Ba7	0.06
	O12--Ba7	0.06
	O10--Ba7	0.06
	O16--Ba7	0.06
	O22--Ce1	0.06
	O18--Ce1	0.06
	O24--Ce1	0.06
	O20--Ce1	0.06
	O8--Ba5	0.07
	O8--Ba3	0.07
	O6--Ba5	0.07
	O6--Ba3	0.07
	O4--Ba5	0.07
	O4--Ba3	0.07
	O2--Ba5	0.07
	O2--Ba3	0.07
	O5--Ba4	0.07
	O3--Ba2	0.07
	O1--Ba4	0.07
	O7--Ba4	0.07
	O7--Ba2	0.07
	O5--Ba2	0.07
	O3--Ba4	0.07
	O1--Ba2	0.07
	O5--Ba6	0.07
	O1--Ba6	0.07
	O7--Ba6	0.07
	O3--Ba6	0.07
	O12--Ba5	0.07
	O10--Ba5	0.07

	O16--Ba3	0.07
	O14--Ba3	0.07
	O21--Ba2	0.07
	O17--Ba4	0.07
	O23--Ba2	0.07
	O19--Ba4	0.07
	O13--Ba6	0.07
	O11--Ba6	0.07
	O9--Ba6	0.07
	O15--Ba6	0.07
	O22--Ba1	0.07
	O24--Ba1	0.07
	O20--Ba1	0.07
	O18--Ba1	0.07
	O22--Ba3	0.07
	O18--Ba5	0.07
	O24--Ba3	0.07
	O20--Ba5	0.07
	O6--Ba7	0.07
	O2--Ba7	0.07
	O8--Ba7	0.07
	O4--Ba7	0.07
	O24--Ba2	0.07
	O22--Ba2	0.07
	O18--Ba4	0.07
	O20--Ba4	0.07
	O12--Ba6	0.07
	O10--Ba6	0.07
	O16--Ba6	0.07
	O14--Ba6	0.07
	O21--Ba1	0.07
	O19--Ba1	0.07
	O23--Ba1	0.07
	O17--Ba1	0.07
	O9--Ba5	0.07
	O13--Ba3	0.07
	O11--Ba5	0.07
	O15--Ba3	0.07
	O21--Ba3	0.07
	O17--Ba5	0.07
	O23--Ba3	0.07
	O19--Ba5	0.07
	O13--Ba7	0.07
	O11--Ba7	0.07
	O9--Ba7	0.07
	O15--Ba7	0.07
	O15--Ce1	0.08
	O13--Ce1	0.08
	O11--Ce1	0.08

	O9--Ce1	0.08
	O8--Ti7	0.43
	O6--Ti5	0.43
	O4--Ti3	0.43
	O2--Ti1	0.43
	O7--Ti8	0.44
	O5--Ti6	0.44
	O3--Ti4	0.44
	O1--Ti2	0.44
	O15--Ti7	0.51
	O15--Ti3	0.51
	O13--Ti5	0.51
	O13--Ti1	0.51
	O11--Ti5	0.51
	O11--Ti3	0.51
	O9--Ti7	0.51
	O9--Ti1	0.51
	O22--Ti6	0.55
	O24--Ti8	0.55
	O24--Ti2	0.55
	O20--Ti8	0.55
	O20--Ti4	0.55
	O18--Ti6	0.55
	O18--Ti2	0.55
	O22--Ti4	0.55
	O16--Ti8	0.56
	O16--Ti4	0.56
	O14--Ti6	0.56
	O14--Ti2	0.56
	O12--Ti6	0.56
	O12--Ti4	0.56
	O10--Ti8	0.56
	O10--Ti2	0.56
	O21--Ti5	0.57
	O23--Ti7	0.57
	O19--Ti3	0.57
	O17--Ti1	0.57
	O23--Ti1	0.57
	O21--Ti3	0.57
	O19--Ti7	0.57
	O17--Ti5	0.57
	O6--Ti6	0.61
	O4--Ti4	0.61
	O8--Ti8	0.61
	O2--Ti2	0.61
	O7--Ti7	0.64
	O5--Ti5	0.64
	O3--Ti3	0.64
	O1--Ti1	0.64

BaTi _{0.875} Ce _{0.125} O ₃	O20--Ba1	-0.12
	O18--Ba5	-0.12
	O16--Ba7	-0.12
	O14--Ba1	-0.12
	O20--Ba7	-0.12
	O18--Ba3	-0.12
	O16--Ba3	-0.12
	O14--Ba5	-0.12
	O11--Ba8	-0.11
	O9--Ba6	-0.11
	O7--Ba4	-0.11
	O5--Ba2	-0.11
	O11--Ba4	-0.11
	O9--Ba2	-0.11
	O7--Ba6	-0.11
	O5--Ba8	-0.11
	O19--Ba8	-0.1
	O17--Ba4	-0.1
	O15--Ba4	-0.1
	O13--Ba6	-0.1
	O19--Ba2	-0.1
	O17--Ba6	-0.1
	O15--Ba8	-0.1
	O13--Ba2	-0.1
	O20--Ba8	-0.09
	O18--Ba4	-0.09
	O16--Ba4	-0.09
	O14--Ba6	-0.09
	O20--Ba2	-0.09
	O18--Ba6	-0.09
	O16--Ba8	-0.09
	O14--Ba2	-0.09
	O21--Ba4	-0.09
	O21--Ba8	-0.09
	O21--Ba6	-0.09
	O21--Ba2	-0.09
	O10--Ba5	-0.09
	O8--Ba3	-0.09
	O12--Ba3	-0.09
	O6--Ba7	-0.09
	O12--Ba7	-0.09
	O6--Ba1	-0.09
	O10--Ba1	-0.09

	O8--Ba5	-0.09
	O22--Ba7	-0.08
	O22--Ba3	-0.08
	O22--Ba1	-0.08
	O22--Ba5	-0.08
	O24--Ba3	-0.07
	O24--Ba5	-0.07
	O24--Ba7	-0.07
	O24--Ba1	-0.07
	O19--Ba1	-0.06
	O17--Ba5	-0.06
	O15--Ba7	-0.06
	O13--Ba1	-0.06
	O19--Ba7	-0.06
	O17--Ba3	-0.06
	O15--Ba3	-0.06
	O13--Ba5	-0.06
	O4--Ba5	-0.06
	O4--Ba3	-0.06
	O2--Ba7	-0.06
	O2--Ba1	-0.06
	O2--Ba3	-0.06
	O4--Ba1	-0.06
	O2--Ba5	-0.06
	O4--Ba7	-0.06
	O9--Ba5	-0.05
	O7--Ba3	-0.05
	O11--Ba3	-0.05
	O5--Ba7	-0.05
	O11--Ba7	-0.05
	O5--Ba1	-0.05
	O9--Ba1	-0.05
	O7--Ba5	-0.05
	O23--Ba6	-0.04
	O23--Ba4	-0.04
	O23--Ba2	-0.04
	O23--Ba8	-0.04
	O3--Ba4	-0.04
	O1--Ba6	-0.04
	O3--Ba6	-0.04
	O1--Ba2	-0.04
	O3--Ba8	-0.04
	O1--Ba4	-0.04

	O3--Ba2	-0.04
	O1--Ba8	-0.04
	O12--Ba8	-0.04
	O10--Ba6	-0.04
	O8--Ba4	-0.04
	O6--Ba2	-0.04
	O12--Ba4	-0.04
	O10--Ba2	-0.04
	O8--Ba6	-0.04
	O6--Ba8	-0.04
	O4--Ce1	-0.04
	O2--Ce1	-0.04
	O8--Ce1	-0.04
	O12--Ce1	-0.04
	O10--Ce1	-0.04
	O6--Ce1	-0.04
	O3--Ce1	-0.02
	O1--Ce1	-0.02
	O21--Ti3	-0.01
	O21--Ti1	-0.01
	O1--Ti6	-0.01
	O3--Ti6	-0.01
	O23--Ti1	-0.01
	O23--Ti3	-0.01
	O2--Ti7	-0.01
	O4--Ti7	-0.01
	O24--Ti2	-0.01
	O24--Ti4	-0.01
	O3--Ti5	-0.01
	O1--Ti5	-0.01
	O22--Ti4	-0.01
	O22--Ti2	-0.01
	O20--Ti2	-0.01
	O18--Ti2	-0.01
	O16--Ti4	-0.01
	O14--Ti4	-0.01
	O15--Ce1	-0.01
	O19--Ce1	-0.01
	O17--Ce1	-0.01
	O13--Ce1	-0.01
	O24--Ti5	-0.01
	O20--Ti3	0
	O18--Ti3	0

	O16--Ti1	0
	O14--Ti1	0
	O19--Ti4	0
	O17--Ti4	0
	O15--Ti2	0
	O13--Ti2	0
	O11--Ti4	0
	O9--Ti4	0
	O7--Ti2	0
	O5--Ti2	0
	O18--Ti7	0
	O16--Ti7	0
	O14--Ti7	0
	O20--Ti7	0
	O8--Ti4	0
	O12--Ti2	0
	O10--Ti2	0
	O6--Ti4	0
	O15--Ti6	0
	O17--Ti6	0
	O13--Ti6	0
	O19--Ti6	0
	O9--Ti1	0
	O7--Ti3	0
	O11--Ti1	0
	O5--Ti3	0
	O7--Ti5	0
	O11--Ti5	0
	O5--Ti5	0
	O9--Ti5	0
	O15--Ti3	0
	O13--Ti3	0
	O19--Ti1	0
	O17--Ti1	0
	O12--Ti3	0
	O10--Ti3	0
	O8--Ti1	0
	O6--Ti1	0
	O4--Ti5	0
	O2--Ti5	0
	O16--Ti5	0
	O20--Ti5	0
	O18--Ti5	0

	O14--Ti5	0
	O1--Ti7	0
	O3--Ti7	0
	O21--Ti4	0
	O21--Ti2	0
	O16--Ti6	0
	O14--Ti6	0
	O18--Ti6	0
	O20--Ti6	0
	O3--Ti1	0
	O1--Ti3	0
	O21--Ti6	0
	O4--Ti2	0
	O2--Ti4	0
	O11--Ti2	0
	O9--Ti2	0
	O7--Ti4	0
	O5--Ti4	0
	O15--Ti7	0
	O17--Ti7	0
	O13--Ti7	0
	O19--Ti7	0
	O15--Ti4	0
	O13--Ti4	0
	O19--Ti2	0
	O17--Ti2	0
	O23--Ti5	0
	O20--Ti1	0
	O18--Ti1	0
	O16--Ti3	0
	O14--Ti3	0
	O22--Ti7	0
	O12--Ti1	0
	O10--Ti1	0
	O8--Ti3	0
	O6--Ti3	0
	O22--Ti6	0
	O23--Ce1	0
	O10--Ti5	0
	O8--Ti5	0
	O6--Ti5	0
	O12--Ti5	0
	O4--Ti1	0

	O2--Ti3	0
	O3--Ti2	0
	O1--Ti4	0
	O21--Ti7	0
	O7--Ti7	0.01
	O11--Ti7	0.01
	O9--Ti7	0.01
	O5--Ti7	0.01
	O12--Ti6	0.01
	O8--Ti6	0.01
	O10--Ti6	0.01
	O6--Ti6	0.01
	O22--Ti3	0.01
	O22--Ti1	0.01
	O24--Ti1	0.01
	O24--Ti3	0.01
	O2--Ti6	0.01
	O4--Ti6	0.01
	O23--Ti2	0.01
	O23--Ti4	0.01
	O7--Ce1	0.01
	O9--Ce1	0.01
	O5--Ce1	0.01
	O24--Ce1	0.02
	O23--Ba3	0.05
	O23--Ba7	0.05
	O23--Ba5	0.05
	O23--Ba1	0.05
	O3--Ba5	0.05
	O3--Ba3	0.05
	O1--Ba7	0.05
	O3--Ba1	0.05
	O1--Ba3	0.05
	O1--Ba1	0.05
	O3--Ba7	0.05
	O1--Ba5	0.05
	O12--Ba2	0.05
	O10--Ba4	0.05
	O8--Ba8	0.05
	O6--Ba6	0.05
	O12--Ba6	0.05
	O10--Ba8	0.05
	O8--Ba2	0.05

	O6--Ba4	0.05
	O20--Ba5	0.05
	O20--Ba3	0.05
	O14--Ba7	0.05
	O14--Ba3	0.05
	O18--Ba7	0.05
	O18--Ba1	0.05
	O16--Ba5	0.05
	O16--Ba1	0.05
	O24--Ba6	0.05
	O24--Ba8	0.05
	O24--Ba4	0.05
	O24--Ba2	0.05
	O4--Ba6	0.05
	O4--Ba4	0.05
	O2--Ba6	0.05
	O4--Ba8	0.05
	O4--Ba2	0.05
	O2--Ba8	0.05
	O2--Ba4	0.05
	O2--Ba2	0.05
	O20--Ba4	0.06
	O18--Ba8	0.06
	O16--Ba6	0.06
	O16--Ba2	0.06
	O14--Ba8	0.06
	O14--Ba4	0.06
	O20--Ba6	0.06
	O18--Ba2	0.06
	O21--Ba7	0.06
	O21--Ba5	0.06
	O21--Ba3	0.06
	O21--Ba1	0.06
	O11--Ba5	0.06
	O9--Ba3	0.06
	O7--Ba7	0.06
	O5--Ba3	0.06
	O11--Ba1	0.06
	O9--Ba7	0.06
	O7--Ba1	0.06
	O5--Ba5	0.06
	O19--Ba5	0.06
	O13--Ba7	0.06

	O19--Ba3	0.06
	O13--Ba3	0.06
	O17--Ba7	0.06
	O17--Ba1	0.06
	O15--Ba5	0.06
	O15--Ba1	0.06
	O11--Ba2	0.06
	O7--Ba8	0.06
	O11--Ba6	0.06
	O9--Ba4	0.06
	O7--Ba2	0.06
	O5--Ba6	0.06
	O9--Ba8	0.06
	O5--Ba4	0.06
	O17--Ba8	0.06
	O15--Ba6	0.06
	O19--Ba6	0.06
	O19--Ba4	0.06
	O17--Ba2	0.06
	O15--Ba2	0.06
	O13--Ba8	0.06
	O13--Ba4	0.06
	O10--Ba3	0.06
	O6--Ba3	0.06
	O12--Ba5	0.06
	O12--Ba1	0.06
	O10--Ba7	0.06
	O8--Ba7	0.06
	O6--Ba5	0.06
	O8--Ba1	0.06
	O22--Ba8	0.06
	O22--Ba4	0.06
	O22--Ba6	0.06
	O22--Ba2	0.06
	O3--Ti4	0.19
	O1--Ti2	0.19
	O23--Ti7	0.2
	O4--Ti3	0.28
	O2--Ti1	0.28
	O24--Ti6	0.3
	O21--Ce1	0.48
	O22--Ti5	0.49
	O11--Ti3	0.52

	O9--Ti3	0.52
	O7--Ti1	0.52
	O5--Ti1	0.52
	O22--Ce1	0.52
	O15--Ti5	0.53
	O19--Ti5	0.53
	O17--Ti5	0.53
	O13--Ti5	0.53
	O12--Ti4	0.54
	O10--Ti4	0.54
	O8--Ti2	0.54
	O6--Ti2	0.54
	O16--Ce1	0.54
	O20--Ce1	0.54
	O18--Ce1	0.54
	O14--Ce1	0.54
	O18--Ti4	0.55
	O16--Ti2	0.55
	O14--Ti2	0.55
	O20--Ti4	0.55
	O7--Ti6	0.56
	O9--Ti6	0.56
	O11--Ti6	0.56
	O5--Ti6	0.56
	O21--Ti5	0.57
	O8--Ti7	0.57
	O12--Ti7	0.57
	O10--Ti7	0.57
	O6--Ti7	0.57
	O17--Ti3	0.57
	O15--Ti1	0.57
	O13--Ti1	0.57
	O19--Ti3	0.57
	O24--Ti7	0.68
	O23--Ti6	0.7
	O3--Ti3	0.72
	O1--Ti1	0.72
	O4--Ti4	0.72
	O2--Ti2	0.72
	O20--Ba1	-0.12
	O18--Ba5	-0.12
	O16--Ba7	-0.12
	O14--Ba1	-0.12

	O20--Ba7	-0.12
	O18--Ba3	-0.12
	O16--Ba3	-0.12
	O14--Ba5	-0.12
	O11--Ba8	-0.11
	O9--Ba6	-0.11
	O7--Ba4	-0.11
	O5--Ba2	-0.11
	O11--Ba4	-0.11
	O9--Ba2	-0.11
	O7--Ba6	-0.11
	O5--Ba8	-0.11
	O19--Ba8	-0.1
	O17--Ba4	-0.1
	O15--Ba4	-0.1
	O13--Ba6	-0.1
	O19--Ba2	-0.1
	O17--Ba6	-0.1
	O15--Ba8	-0.1
	O13--Ba2	-0.1
	O20--Ba8	-0.09
	O18--Ba4	-0.09
	O16--Ba4	-0.09
	O14--Ba6	-0.09
	O20--Ba2	-0.09
	O18--Ba6	-0.09
	O16--Ba8	-0.09
	O14--Ba2	-0.09
	O21--Ba4	-0.09
	O21--Ba8	-0.09
	O21--Ba6	-0.09
	O21--Ba2	-0.09
	O10--Ba5	-0.09
	O8--Ba3	-0.09
	O12--Ba3	-0.09
	O6--Ba7	-0.09
	O12--Ba7	-0.09
	O6--Ba1	-0.09
	O10--Ba1	-0.09
	O8--Ba5	-0.09
	O22--Ba7	-0.08
	O22--Ba3	-0.08
	O22--Ba1	-0.08

	O22--Ba5	-0.08
	O24--Ba3	-0.07
	O24--Ba5	-0.07
	O24--Ba7	-0.07
	O24--Ba1	-0.07
	O19--Ba1	-0.06
	O17--Ba5	-0.06
	O15--Ba7	-0.06
	O13--Ba1	-0.06
	O19--Ba7	-0.06
	O17--Ba3	-0.06
	O15--Ba3	-0.06
	O13--Ba5	-0.06
	O4--Ba5	-0.06
	O4--Ba3	-0.06
	O2--Ba7	-0.06
	O2--Ba1	-0.06
	O2--Ba3	-0.06
	O4--Ba1	-0.06
	O2--Ba5	-0.06
	O4--Ba7	-0.06
	O9--Ba5	-0.05
	O7--Ba3	-0.05
	O11--Ba3	-0.05
	O5--Ba7	-0.05
	O11--Ba7	-0.05
	O5--Ba1	-0.05
	O9--Ba1	-0.05
	O7--Ba5	-0.05
	O23--Ba6	-0.04
	O23--Ba4	-0.04
	O23--Ba2	-0.04
	O23--Ba8	-0.04
	O3--Ba4	-0.04
	O1--Ba6	-0.04
	O3--Ba6	-0.04
	O1--Ba2	-0.04
	O3--Ba8	-0.04
	O1--Ba4	-0.04
	O3--Ba2	-0.04
	O1--Ba8	-0.04
	O12--Ba8	-0.04
	O10--Ba6	-0.04

	O8--Ba4	-0.04
	O6--Ba2	-0.04
	O12--Ba4	-0.04
	O10--Ba2	-0.04
	O8--Ba6	-0.04
	O6--Ba8	-0.04
	O4--Ce1	-0.04
	O2--Ce1	-0.04
	O8--Ce1	-0.04
	O12--Ce1	-0.04
	O10--Ce1	-0.04
	O6--Ce1	-0.04
	O3--Ce1	-0.02
	O1--Ce1	-0.02
	O21--Ti3	-0.01
	O21--Ti1	-0.01
	O1--Ti6	-0.01
	O3--Ti6	-0.01
	O23--Ti1	-0.01
	O23--Ti3	-0.01
	O2--Ti7	-0.01
	O4--Ti7	-0.01
	O24--Ti2	-0.01
	O24--Ti4	-0.01
	O3--Ti5	-0.01
	O1--Ti5	-0.01
	O22--Ti4	-0.01
	O22--Ti2	-0.01
	O20--Ti2	-0.01
	O18--Ti2	-0.01
	O16--Ti4	-0.01
	O14--Ti4	-0.01
	O15--Ce1	-0.01
	O19--Ce1	-0.01
	O17--Ce1	-0.01
	O13--Ce1	-0.01
	O24--Ti5	-0.01
	O20--Ti3	0
	O18--Ti3	0
	O16--Ti1	0
	O14--Ti1	0
	O19--Ti4	0
	O17--Ti4	0

	O15--Ti2	0
	O13--Ti2	0
	O11--Ti4	0
	O9--Ti4	0
	O7--Ti2	0
	O5--Ti2	0
	O18--Ti7	0
	O16--Ti7	0
	O14--Ti7	0
	O20--Ti7	0
	O8--Ti4	0
	O12--Ti2	0
	O10--Ti2	0
	O6--Ti4	0
	O15--Ti6	0
	O17--Ti6	0
	O13--Ti6	0
	O19--Ti6	0
	O9--Ti1	0
	O7--Ti3	0
	O11--Ti1	0
	O5--Ti3	0
	O7--Ti5	0
	O11--Ti5	0
	O5--Ti5	0
	O9--Ti5	0
	O15--Ti3	0
	O13--Ti3	0
	O19--Ti1	0
	O17--Ti1	0
	O12--Ti3	0
	O10--Ti3	0
	O8--Ti1	0
	O6--Ti1	0
	O4--Ti5	0
	O2--Ti5	0
	O16--Ti5	0
	O20--Ti5	0
	O18--Ti5	0
	O14--Ti5	0
	O1--Ti7	0
	O3--Ti7	0
	O21--Ti4	0

	O21--Ti2	0
	O16--Ti6	0
	O14--Ti6	0
	O18--Ti6	0
	O20--Ti6	0
	O3--Ti1	0
	O1--Ti3	0
	O21--Ti6	0
	O4--Ti2	0
	O2--Ti4	0
	O11--Ti2	0
	O9--Ti2	0
	O7--Ti4	0
	O5--Ti4	0
	O15--Ti7	0
	O17--Ti7	0
	O13--Ti7	0
	O19--Ti7	0
	O15--Ti4	0
	O13--Ti4	0
	O19--Ti2	0
	O17--Ti2	0
	O23--Ti5	0
	O20--Ti1	0
	O18--Ti1	0
	O16--Ti3	0
	O14--Ti3	0
	O22--Ti7	0
	O12--Ti1	0
	O10--Ti1	0
	O8--Ti3	0
	O6--Ti3	0
	O22--Ti6	0
	O23--Ce1	0
	O10--Ti5	0
	O8--Ti5	0
	O6--Ti5	0
	O12--Ti5	0
	O4--Ti1	0
	O2--Ti3	0
	O3--Ti2	0
	O1--Ti4	0
	O21--Ti7	0

	O7--Ti7	0.01
	O11--Ti7	0.01
	O9--Ti7	0.01
	O5--Ti7	0.01
	O12--Ti6	0.01
	O8--Ti6	0.01
	O10--Ti6	0.01
	O6--Ti6	0.01
	O22--Ti3	0.01
	O22--Ti1	0.01
	O24--Ti1	0.01
	O24--Ti3	0.01
	O2--Ti6	0.01
	O4--Ti6	0.01
	O23--Ti2	0.01
	O23--Ti4	0.01
	O7--Ce1	0.01
	O9--Ce1	0.01
	O5--Ce1	0.01
	O24--Ce1	0.02
	O23--Ba3	0.05
	O23--Ba7	0.05
	O23--Ba5	0.05
	O23--Ba1	0.05
	O3--Ba5	0.05
	O3--Ba3	0.05
	O1--Ba7	0.05
	O3--Ba1	0.05
	O1--Ba3	0.05
	O1--Ba1	0.05
	O3--Ba7	0.05
	O1--Ba5	0.05
	O12--Ba2	0.05
	O10--Ba4	0.05
	O8--Ba8	0.05
	O6--Ba6	0.05
	O12--Ba6	0.05
	O10--Ba8	0.05
	O8--Ba2	0.05
	O6--Ba4	0.05
	O20--Ba5	0.05
	O20--Ba3	0.05
	O14--Ba7	0.05

	O14--Ba3	0.05
	O18--Ba7	0.05
	O18--Ba1	0.05
	O16--Ba5	0.05
	O16--Ba1	0.05
	O24--Ba6	0.05
	O24--Ba8	0.05
	O24--Ba4	0.05
	O24--Ba2	0.05
	O4--Ba6	0.05
	O4--Ba4	0.05
	O2--Ba6	0.05
	O4--Ba8	0.05
	O4--Ba2	0.05
	O2--Ba8	0.05
	O2--Ba4	0.05
	O2--Ba2	0.05
	O20--Ba4	0.06
	O18--Ba8	0.06
	O16--Ba6	0.06
	O16--Ba2	0.06
	O14--Ba8	0.06
	O14--Ba4	0.06
	O20--Ba6	0.06
	O18--Ba2	0.06
	O21--Ba7	0.06
	O21--Ba5	0.06
	O21--Ba3	0.06
	O21--Ba1	0.06
	O11--Ba5	0.06
	O9--Ba3	0.06
	O7--Ba7	0.06
	O5--Ba3	0.06
	O11--Ba1	0.06
	O9--Ba7	0.06
	O7--Ba1	0.06
	O5--Ba5	0.06
	O19--Ba5	0.06
	O13--Ba7	0.06
	O19--Ba3	0.06
	O13--Ba3	0.06
	O17--Ba7	0.06
	O17--Ba1	0.06

	O15--Ba5	0.06
	O15--Ba1	0.06
	O11--Ba2	0.06
	O7--Ba8	0.06
	O11--Ba6	0.06
	O9--Ba4	0.06
	O7--Ba2	0.06
	O5--Ba6	0.06
	O9--Ba8	0.06
	O5--Ba4	0.06
	O17--Ba8	0.06
	O15--Ba6	0.06
	O19--Ba6	0.06
	O19--Ba4	0.06
	O17--Ba2	0.06
	O15--Ba2	0.06
	O13--Ba8	0.06
	O13--Ba4	0.06
	O10--Ba3	0.06
	O6--Ba3	0.06
	O12--Ba5	0.06
	O12--Ba1	0.06
	O10--Ba7	0.06
	O8--Ba7	0.06
	O6--Ba5	0.06
	O8--Ba1	0.06
	O22--Ba8	0.06
	O22--Ba4	0.06
	O22--Ba6	0.06
	O22--Ba2	0.06
	O3--Ti4	0.19
	O1--Ti2	0.19
	O23--Ti7	0.2
	O4--Ti3	0.28
	O2--Ti1	0.28
	O24--Ti6	0.3
	O21--Ce1	0.48
	O22--Ti5	0.49
	O11--Ti3	0.52
	O9--Ti3	0.52
	O7--Ti1	0.52
	O5--Ti1	0.52
	O22--Ce1	0.52

	O15--Ti5	0.53
	O19--Ti5	0.53
	O17--Ti5	0.53
	O13--Ti5	0.53
	O12--Ti4	0.54
	O10--Ti4	0.54
	O8--Ti2	0.54
	O6--Ti2	0.54
	O16--Ce1	0.54
	O20--Ce1	0.54
	O18--Ce1	0.54
	O14--Ce1	0.54
	O18--Ti4	0.55
	O16--Ti2	0.55
	O14--Ti2	0.55
	O20--Ti4	0.55
	O7--Ti6	0.56
	O9--Ti6	0.56
	O11--Ti6	0.56
	O5--Ti6	0.56
	O21--Ti5	0.57
	O8--Ti7	0.57
	O12--Ti7	0.57
	O10--Ti7	0.57
	O6--Ti7	0.57
	O17--Ti3	0.57
	O15--Ti1	0.57
	O13--Ti1	0.57
	O19--Ti3	0.57
	O24--Ti7	0.68
	O23--Ti6	0.7
	O3--Ti3	0.72
	O1--Ti1	0.72
	O4--Ti4	0.72
	O2--Ti2	0.72