Table 4: Coupling Strength for the Adjusted Empirical Force Field

															0		· J	<u> </u>		,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,		JC 1 10	ciu						
		1	2	. 3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	26	=
_		0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	_
2	?		0	0.0	0	0.0	0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	ì
3	3			o	0.0	0.0	0.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	٠,
4	ı				0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0,0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	(
5	i					0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	o.o	0.0	
6	,						0	0.0	0.0	. 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	(
7	•							0	0.0	0.0	0.0	0,0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	(
8	:								0	0.0	0.0	0.0	0.0	0:0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	(
9	•									0	1.8	-0.1	0.0	0.0	-0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.6	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	(
10	0										0.	-5.4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	8.5	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0,0	0.0	0.0	(
1	1											, 0	7.4	0.0	0.0	1.4	0.0	-1.0	1.2	0.7	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	(
13	2 .											,	ο.	10.2	0.0	0.0	0.2	0.7	0.0	0.7	0.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	(
13	3													0	0.0	-0.5	0.0	0.3	0.8	0.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	(
14	ı														0	-14.0	0.2	0.6	-0.2	2.3	1.2	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	(
15	5					٠.			`							0	4.9	1.1	1.5	-0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	ί
16	5										L						0	0.9	3.5	0.0	0.2	0.6	0.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	(
17	7								*.									. 0 .	0.9	3.8	11.4	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	(
18	3																		0	20.3	0.3	0.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	(
19	•							٠.										2		0	18.4	1.5	3.4	0.1	0.5	0.0	0.0	0.0	(
20											,										0	5.8	5.3	0.0	0.3	0.0	0.0	0.0	(
21	l																					0.	-3.6	-0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	(
22																							0	1.0-	0.0	0.0	0.0	0.0	(
23																								0	0.0	0.0	0.0	0.0	ŧ,
24																				•	4.1				0	0.0	0.0	0.0	-{
25															*										•	0	0.0	0.0	ı
26																											0	0.0	ι
27				•																								0	•
28									:																				
29								. ,	•																				

Table 5: Coupling Strength for the Ab Initio Force Field

	1	2	3	. 4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15 ,	16	· 17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	26	28	2
i	0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.1	0.0	0.0	0
2		0	0.0	0.0	4.1	0.0	1.4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
3			0	-1.2	0.0	1.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0,0	0.0	0.0	0.0	-0
4	٠,	,		0	0.0	0.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	. 0.0	0.0	0.0	0.0	0
5					0	0.0	2.4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 ,	0.0	ò
6						0	-0.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
7							. 0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
8				-				0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 ·	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
9									0.	-0.1	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
10										0	0.0	-0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
11											0	0.0	0.0	0,0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
12										4,		. 0	0.0	0.0	0.0	0.0	0,0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.
13													0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
14														0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
15															0.	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0,0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
16																0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	· 0
17																	0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
18																		0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
19																			0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
20																				0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
21									•												0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
22																						0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0
23																							0	1.1	0.0	0.1	0.0	0.0	0
24									,															0	0.0	1.0	0.0	0.0	a
25							:																		0	0.0	0.0	0.0	0
26								*.																		0 .	0.0	0.2	0
27																											0	0.1	0
28																												0	0
29														٠.															. 1