

Estudio teórico de los sistemas moleculares CH₅⁺, CH₅ y CH₅⁻. Energía y conformación geométrica de distintos estados estacionarios

Novoa Vide, Juan José

ADVERTIMENT. La consulta d'aquesta tesi queda condicionada a l'acceptació de les següents condicions d'ús: La difusió d'aquesta tesi per mitjà del servei TDX (www.tesisenxarxa.net) ha estat autoritzada pels titulars dels drets de propietat intel·lectual únicament per a usos privats emmarcats en activitats d'investigació i docència. No s'autoritza la seva reproducció amb finalitats de lucre ni la seva difusió i posada a disposició des d'un lloc aliè al servei TDX. No s'autoritza la presentació del seu contingut en una finestra o marc aliè a TDX (framing). Aquesta reserva de drets afecta tant al resum de presentació de la tesi com als seus continguts. En la utilització o cita de parts de la tesi és obligat indicar el nom de la persona autora.

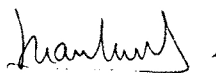
ADVERTENCIA. La consulta de esta tesis queda condicionada a la aceptación de las siguientes condiciones de uso: La difusión de esta tesis por medio del servicio TDR (www.tesisenred.net) ha sido autorizada por los titulares de los derechos de propiedad intelectual únicamente para usos privados enmarcados en actividades de investigación y docencia. No se autoriza su reproducción con finalidades de lucro ni su difusión y puesta a disposición desde un sitio ajeno al servicio TDR. No se autoriza la presentación de su contenido en una ventana o marco ajeno a TDR (framing). Esta reserva de derechos afecta tanto al resumen de presentación de la tesis como a sus contenidos. En la utilización o cita de partes de la tesis es obligado indicar el nombre de la persona autora.

WARNING. On having consulted this thesis you're accepting the following use conditions: Spreading this thesis by the TDX (www.tesisenxarxa.net) service has been authorized by the titular of the intellectual property rights only for private uses placed in investigation and teaching activities. Reproduction with lucrative aims is not authorized neither its spreading and availability from a site foreign to the TDX service. Introducing its content in a window or frame foreign to the TDX service is not authorized (framing). This rights affect to the presentation summary of the thesis as well as to its contents. In the using or citation of parts of the thesis it's obliged to indicate the name of the author.

UNIVERSIDAD DE BARCELONA

ESTUDIO TEORICO DE LOS SISTEMAS
MOLECULARES CH_5^+ , CH_5 Y CH_5^- .
ENERGIA Y CONFORMACION GEOMETRICA
DE DISTINTOS ESTADOS ESTACIONARIOS.

Memoria presentada para
optar al Grado de Doctor en
Ciencias Químicas por el
Licenciado
Juan José Novoa Vide



Barcelona, Junio de 1931

VI. A P E N D I C E S

Apéndice I.- Listado del programa INITIO. Las líneas 43 a 61 de la página 71 y las diez primeras de la siguiente van colocadas en la página 112 después de la línea 31.

MEMBER-NAME (JNVINIM) DT-CODE (0002) LEVEL (0001) CREA-DATE
 SOURCE STATEMENT

```

C      ELEMENT JNVS0104
C-----
C
C      PROGRAMA DE CALCULO AB INITIO
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C      ***           ***           ***
C      ***           ***           ***
C
C      ***   *   *   ***   *****   ***   *****
C      ***   *   *   ***   *****   ***   *****
C      *     **  *   *     *           *     *     *
C      *     *  *  *   *     *           *     *     *
C      *     *  *  *   *     *           *     *     *
C      *     *  *  *   *     *           *     *     *
C
C      ***   *   *   ***   *           ***   *****
C      ***   *   *   ***   *           ***   *****
C      ***   *   *   ***   *           ***   *****
C      ***   *   *   ***   *           ***   *****
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C      ESTA ES LA VERSION 1 DEL PROGRAMA
C      FUE ESCRITA COMO PARTE DE LA TESIS DOCTORAL DE J. J. NOVOA
C      EN EL DEPARTAMENTO DE QUIMICA FISICA DE LA FACULTAD DE QUIMICA
C      DE LA UNIVERSIDAD DE BARCELONA DURANTE EL AÑO 1979.
C      SE MONTO Y COMPROBO SU FUNCIONAMIENTO DURANTE EL AÑO 1980 EN UN
C      ORDENADOR FACOM 235/38
C      EL LENGUAJE ELEGIDO FUE FORTRAN (LEVEL E), AUNQUE EN ALGUNAS
C      SUBROUTINAS EL NIVEL DEL LENGUAJE FUESE MAS BAJO PARA PODERSE ADAP-
C      TAR A CUALQUIER COMPILADOR SIN GRANDES CAMBIOS.
C      LA MEMORIA NECESARIA PARA EL FUNCIONAMIENTO DE ESTE PROGRAMA ES
C      DE 90KB COMO MAXIMO USANDO SEGMENTACION .
C      SE NECESITAN RESERVAR 23 UNIDADES DE DISCO PARA EL ALMACENAMIENTO
C      DE LOS RESULTADOS INTERMEDIOS Y UNA UNIDAD DE CINTA PARA
C      EL CASO DE UN "RESTART".
C      TODO EL PROGRAMA FUE ESCRITO EN DOBLE PRECISION PARA LOS REALES
C      Y PRECISION SENCILLA PARA LOS ENTEROS.
C
C      LA ESTRUCTURA PRIMARIA DEL PROGRAMA SE COMPONE DE TRES GRANDES
C      PARTES:EL CALCULO DE INTEGRALES, CAPAS CERRADAS Y, CAPAS ABIERTAS.
C      UNA DESCRIPCION DE CADA PARTE SE ENCUENTRA EN LA SUBROUTINA QUE
C      GOBIERNA CADA PARTE. ASI MISMO ALLI SE ENCUENTRA UNA DECLARACION
C      DE LAS VARIABLES UTILIZADA2 Y SU ALMACENAMIENTO.
C
C      EL PROGRAMA SE IDEO SOBRE LA BASE DE UN METODO HARTREE-FOCK
C      MONODETERMINANTAL TANTO PARA CAPAS CERRADAS COMO PARA CAPAS
C      ABIERTAS.
C
C      LA ENTRADA DE DATOS SE PENSO POR FICHAS, CON POSIBILIDAD DE ENTPARJ
C      POR CINTA LOS DATOS DE LOS DISTINTOS RESTARTS PREVISTOS.
C      LA SALIDA DE RESULTADOS ES POR LISTADO Y/O CINTA.
    
```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

C SE HA PREVISTO UNA ESTRUCTURA POR MODULOS SEGUN UN ESQUEMA DE PROGRAMACION ESTRUCTURADA DE DISENO "TOP-DOWN"

C-----

C LAS LIMITACIONES NUMERICAS DEL PROGRAMA SON:

C *NUMERO DE NUCLEOS=10

C *NUMERO DE ORBITALES ATOMICOS DE BASE=30

C *NUMERO DE CAPAS CERRADAS=1

C *NUMERO DE CAPAS ABIERTAS=2

C-----

C-----

C-----

C-----

C LA ENTRADA DE DATOS CONSTA DE LOS SIGUIENTES APARTADOS

C

C SEGUN EL CALCULO DEFINIDO EN IOPT, SE LEEN LOS PARAMETROS DE LOS

C APARTADOS INDICADOS EN EL SIGUIENTE CUADRO:

C IOPT APARTADOS

C **** *****

C 1 I,III,IV,V,(VI),VII-VIII

C 2 I,IX(VER NOTA EN IX)

C 3 I,X

C 4 I,X,IX

C 5 I,III,IV

C 6 I(SOLO IOPT),V,VI,VII-VIII

C 7 I(SOLO IOPT),II,VII-VIII

C

C

C I *** **

C ***DATOS GENERALES***

C *** **

C -SE LEE EL PARAMETRO IOPT QUE NOS SIRVE PARA DEFINIR LA RUTA

C EL PROGRAMA TIENE ESTAS OPCIONES DE CALCULO:

C IOPT TIPO DE CALCULO

C =====

C 1 CALCULO DE LA ENERGIA PARA UN PUNTO INDIVIDUAL

C 2 OPTIMIZACION DE GEOMETRIA

C 3 BARRIDO DE PUNTOS A PARTIR DE UNO QUE SE ENTRA

C 4 OPTIMIZACION+BARRIDO

C 5 CALCULO DE LAS INTEGRALES PARA UN PUNTO DADO

C 6 PROCESO RESTART PARA EL GRUPO SCF

C 7 PROCESO RESTART SOBRE CLOSED-OPEN RHF

C

C FORMATO I2

C ** SI IOPT=1,2,3,4,5 SE LEEN LAS SIGUIENTES FICHAS,EN CASO

C CONTRARIO SE VA AL SIGUIENTE APARTADO **

C -LEEMOS EL NUMERO LOGICO DE LA UNIDAD SOBRE LA QUE VAMOS A

C IMPRIMIR LOS RESULTADOS

C EL FORMATO ES I2

C -LEEMOS EL TITULO DE LA MOLECULA A TRATAR

C EL FORMATO ES 10A8

C -NUMERO DE NUCLEOS(NUMNUC) Y DE ORBITALES (NUMORB)

C EL FORMATO ES 2I2

C

C *****

C

C II *** **

C *** DATOS RUTA***

C *** **

C *SOLO EN EL CASO EN QUE IOPT=7*

C -SE LEE TIPO,CON LAS VARIEDADES CRHF-ORHF

C FORMATO A8

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C                                     *****
C
C III ***                               ***
C ***DATOS POINT***
C ***                               ***
C   -IREAD:TIPO DE COORDENADAS A LEER
C     IREAD=0-->COORDENADAS CARTESIANAS
C     IREAD=OTRO NUMERO-->COORDENADAS INTERNAS
C   *-SI USAMOS COORDENADAS CARTESIANAS-*
C   -PARA CADA NUCLEO-UNA FICHA POR NUCLEO-LEEMOS:
C     COL 1-5:NUMERO ATOMICO DEL NUCLEO EN CUESTION
C     COL 6-25:COORDENADA X
C     COL 26-45:COORDENADA Y
C     COL 46-65:COORDENADA Z
C     EL FORMATO ES I5,3(D20.11)
C   *-SI USAMOS COORDENADAS INTERNAS-*
C   -LEEMOS EL NUMERO ATOMICO DEL NUCLEO CONSIDERADO(I),Y ...
C     EL NUMERO EN EL ORDEN DE ENTRADA,DEL ATOMO CON EL QUE ESTA
C       UNIDO FORMANDO ENLACE(J) ,Y ...
C     LA DISTANCIA-EN ANGSTROMS-ENTRE LOS ATOMOS I-J ,Y ...
C     EL NUMERO,EN EL ORDEN DE ENTRADA,DEL ATOMO K SOBRE EL QUE
C       REFERIMOS EL ANGULO I-J-K(EL ANGULO SE MIDE COMO EL QUE
C       FORMAN LOS ENLACES I-J Y J-K MEDIDO DESDE I-J HASTA J-K
C       CON ESTE CONVENIO PARA SU VALOR:
C         SI J-K ESTA A LA DERECHA DE I-J,EL ANGULO SE MIDE EN
C           EL MISMO SENTIDO QUE LAS AGUJAS DEL RELOJ
C         SI J-K ESTA A LA IZQUIERDA DE I-J SE MIDEN EN EL
C           SENTIDO CONTRARIO A LAS AGUJAS DEL RELOJ,)Y...
C     VALOR DEL ANGULO EN GRADOS ,Y ...
C     EL ATOMO L QUE NOS DEFINE JUNTO CON EL J Y K EL PLANO DE
C     REFERENCIA PARA EL ANGULO DIEDRO,Y ...
C     EL VALOR EN GRADOS DEL ANGULO DIEDRO,Y ...
C     UN NUMERO QUE NOS INDICA SI EL ATOMO I ESTA POR ENCIMA,POR
C     DEBAJO O EN EL PLANO DE REFERENCIA DEL ANGULO DIEDRO,CON ESTA
C     CONVENCION:
C       0=ESTA EN EL PLANO
C       1=ESTA POR ENCIMA
C       -1=ESTA POR DEBAJO
C*   ***UNA FICHA EN BLANCO PARA INDICAR EL FINAL DE LA LECTURA
C     EL FORMATO ES I3,I4,D7.4,I4,D11.6,I4,D11.6,I4
C                                     *****
C
C IV ***                               ***
C ***DATOS INTEGRALES***
C ***                               ***
C   LOS ORBITALES DE LA BASE TIENEN LA FORMA GENERAL:
C     ORBITAL=(CS*S+CPX*PX+CPY*PY+CPZ*PZ)*EXP(ALFA**2)
C   Y POR LO TANTO SE PUEDE USAR UNA CIERTA CONTRACCION EN LA BASE
C   EN CASO DE CONTRACCION,TODOS LOS ORBITALES CONTRAIDOS CON EL
C   MISMO EXPONENTE SE CENTRAN EN EL MISMO PUNTO, INDICADO POR EL
C   ORBITAL DE TIPO S
C   *- SI ESTAMOS DENTRO DE LOS ESQUEMAS SCAN U OPTIM-*
C   -NO SE LEEN LAS COORDENADAS Y EXPONENTES ORBITALES
C   -LAS OPCIONES DE ESCRITURA DE LAS INTEGRALES SE IMPONEN =0
C   -SE IMPONE ISYM=0
C
C   *-SI ESTAMOS DENTRO DEL ESQUEMA POINT-*
C   -PARA CADA ORBITAL-UNA FICHA POR ORBITAL- LEEMOS:
C     COL 1-2:NUMERO DEL NUCLEO-EN EL ORDEN DE ENTRADA DE DATOS DE
C     LOS NUCLEOS-AL QUE ASIGNAMOS EL ORBITAL
C     COL 3:EN BLANCO
C     COL 4-5:CLASE DE ORBITAL ,CON ESTE CONVENIO NUMERICO:

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C          0-S
C          1-PX
C          2-PY
C          3-PZ
C          COL 6-20 COORDENADA X
C          COL 21-35:COORDENADA Y
C          COL 36-50:COORDENADA Z
C          COL 51-70: PARAMETRO EXPONENCIAL DE LA FUNCION
C          EL FORMATO ES I2,I1X,I2,3(D15,8),D20.11
C          -UNA VARIABLE(I,CON) PARA INDICAR SI SE REALIZA CONTRACCION
C          DE LOS ORBITALES DE LA BASE
C          *ICON=0-->NO SE CONTRAE
C          *ICON=1-->SE CONTRAE Y SE LEEN LOS COEFICIENTES DE CONTR.
C          -LEEMOS LOS COEFICIENTES DE CONTRACCION EN EL ORDEN (S,PX,PY,PZ
C          ) EN FORMATO 4D20.11
C          (UNA FICHA POR CADA ORBITAL DE TIPO S LEIDO)
C          -PARAMETROS IOPT(I) PARA SABER QUE TIPO DE ESCRITURA HACEMOS DE
C          LAS INTEGRALES
C          **SI IOPT(1)=0 NO SE ESCRIBEN LAS INTEGRALES DE SOLAPA-
C          MIENTO,EN CASO CONTRARIO SI.
C          ** SI IOPT(2)=0 NO SE ESCRIBEN LAS INTEGRALES DE ENERGIA
C          CINETICA NI LAS DE ATRACCION POR LOS NUCLEOS,EN CASO
C          CONTRARIO -VALORES DISTINTOS DE CERO- SE ESCRIBEN.
C          ** SI IOPT(3)=0 NO SE ESCRIBEN LAS INTEGRALES BIELECTRO-
C          NICAS,EN CASO DE QUE EL NUMERO SEA DISTINTO DE CERO
C          SI QUE SE ESCRIBEN.
C          -UNA VARIABLE(ISYM)QUE NOS INDICA SI VAMOS A HACER USO DE LAS
C          PROPIEDADES DE SIMETRIA DE LA MOLECULA EN EL CALCULO DE LAS
C          INTEGRALES
C          *ISYM=0--->NO HACEMOS USO DE LAS PROPIEDADES
C          *ISYM=OTRO--->SI SE HACE USO
C          EL FORMATO ES I1
C          -***** EN CASO QUE SE HAGA USO DE LAS PROPIEDADES(ISYM#0)SE
C          LEEN ESTAS FICHAS
C          *NTRANS=NUMERO DE TRANSFORMACIONES DE SIMETRIA EN
C          FORMATO I2(MAXIMO DE 30)
C          *MTRANS(I,J)=MATRIZ DE LAS TRANSFORMACIONES DE LA BA-
C          SE;SOLO SE CONSIDERAN TRANSFORMACIONES DENTRO DE LA
C          BASE(MAXIMO DE 30),EL FORMATO ES 30I2,LEYENDOSE UNA
C          FICHA POR CADA ORBITAL DE BASE
C
C          *****
C
C          V   ***           ***
C          ***DATOS SCF***
C          ***           ***
C          -NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES,NNN,IR,INR,INC,IW
C          NUMITE=NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES
C          NNN=CRITERIO DE CONVERGENCIA
C          1:ENERGIA ELECTRONICA TOTAL
C          2:ENERGIAS ORBITALES
C          3:MATRIZ DE DENSIDAD
C          IR=ESCRITURA DE LOS VALORES Y VECTORES PROPIOS EN CADA
C          ITERACION
C          0:NO SE ESCRIBEN
C          1:SE ESCRIBEN LOS VALORES PROPIOS
C          2:SE ESCRIBEN LOS VALORES Y VECTORES PROPIOS
C          INC=OBTENCION DE LA MATRIZ C INICIAL
C          0:SE CALCULA LA MATRIZ C
C          1:SE CALCULA(HAY QUE PREVENIR MAS FICHAS DE DATOS)
C          IW=ESCRITURA DE LOS RESULTADOS INTERMEDIOS
C          0:NO SE ESCRIBEN

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C          1:SE ESCRIBEN
C          (FORMATO 40I2)
C      -EL LIMITE DE CONVERGENCIA EN LAS DIAGONALIZACIONES-EPS-,EL DE
C      CONVERGENCIA EN LA ENERGIA ELECTRONICA-EPSENT-EN LAS ENERGIAS
C      ORBITALES-EPSENO-,Y EL DE CONVERGENCIA EN LOS ELEMENTOS DE LA
C      MATRIZ DE DENSIDAD-EPSCOE-.
C      EPS=EN LA DIAGONALIZACION JACOBI
C      EPSENT=EN LA CONVERGENCIA DE LA ENERGIA ELECTRONICA
C      EPSENO=CONVERGENCIA DE LAS ENERGIAS ORBITALES
C      EPSCOE=EN LOS ELEMENTOS DE LA MATRIZ DE DENSIDAD(FORMATO
C          4(D15,8,5X)
C      -EL TIPO DE CALCULO A REALIZAR,SE ADMITEN ESTOS CASOS:
C          CRHF:CAPAS CERRADAS USANDO EL METODO H-F RESTRINGIDO
C          ORHF:CAPAS ABIERTAS USANDO EL METODO H-F RESTRINGIDO
C          SE ESCRIBEN UNA DE ESTAS PALABRAS EN LAS PRIMERAS 8 COL.
C          OBLIGATORIAMENTE LA PALABRA CRHF O ORHF DEBE TERMINAR EN LA
C          COLUMNA 8
C      -PARAMETRO IACEL PARA INDICAR SI SE ACELERA LA CONVERGENCIA
C          SI IACEL=0--> NO SE ACELERA
C          SI IACEL=1--> SE ACELERA
C      NOTA:SEGUN EL TIPO DE PROCESO,SE LEEN LOS DATOS DE CRHF O ORHF,VER,
C          EN CADA CASO,LOS DATOS DE ENTRADA EN LAS SUBROUTINAS ADECUADAS.
C          ¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥

```

```

C VI   ***           ***
C      ***DATOS CINI***
C      ***           ***
C      -SI INC=1 LEEMOS C EN BLOQUE DE 4 COLUMNAS DE FORMA QUE CADA
C      FICHA NOS INTRODUCE UNA FILA,SE LEEN TANTAS FICHAS COMO
C      (NUMERO DE COLUMNAS /4)*NUMERO DE FILAS,
C      EL ORDEN DE PRELACION ES DE LEER DENTRO DE CADA BLOQUE TODAS
C      LAS FILAS PARA PASAR LUEGO AL OTRO BLOQUE,
C      EL FORMATO ES 4(D20.13)
C          ¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥¥

```

```

C VII  ***           ***
C      ***DATOS CLOSED RESTRICTED***
C      ***           ***
C      -LEEMOS EL NUMERO DE PARES DE ELECTRPNES-NPE-
C      EL FORMATO ES I3
C      *** SI SE TRATA DE CAPAS ABIERTAS ***

```

```

C VIII***           ***
C      ***DATOS OPEN RESTRICTED***
C      ****           ***
C      -NUMERO DE CAPAS ABIERTAS(NOPSHL)
C          NOPSHL=0 UNA CAPA CERRADA
C          NOPSHL=1 UNA CAPA CERRADA Y UNA ABIERTA
C          NOPSHL=2 UNA CAPA CERRADA Y DOS ABIERTAS
C          FORMATO I2
C      -NUMERO DE MO EN CADA CAPA
C          FORMATO 3I2
C      -NUMERO DE UCUPACION DE CADA CAPA
C          FORMATO 2I2
C      -CONSTANTES ALFA EN FORMA DE MATRIZ
C          UNA FICHA PARA CADA CAPA EN FORMATO 2D10.3
C      -CONSTANTES BETA DE LA MISMA FORMA QUE LAS ALFA
C      -PARAMETRO ILANDA, PARA INDICAR SI SE LEE EL PARAMETRO LANDA /
C          O SE TOMA EL VALOR STANDARD DE CERO,
C          FORMATO I2
C      -PARAMETRO LANDA
C          FORMATO D15,8

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C                                     *****
C                                     *****
C IX  ***                               ***
C     *** DATOS DE SCAN ***
C     ***                               ***
C     *COORDENADAS INTERNAS DE LA MOLECULA SI NSTEP=0
C     VER CONVENCION PARA LA LECTURA DE LAS COORDENADAS INTERNAS
C     **-EXPONENTES DE LOS ORBITALES DE LA BASE
C     LOS ORBITALES SE CENTRAN SOBRE LOS NUCLEOS Y SE MUEVEN
C     CON ELLOS DURANTE LA VARIACION, SIN QUE VARIEN LOS
C     EXPONENTES
C     FORMATO 30D20,11
C     *NUMERO DE PUNTOS DE LA SUPERFICIE A CALCULAR
C     FORMATO I2
C     *CORRECCIONES ENTRE LOS PUNTOS
C     FORMATO 15I2,D10,4
C     LAS CORRECCIONES SE LEEN CON ESTAS CONVENCIONES:
C     -CADA CONJUNTO DE TARJETAS SIMULTANEAMENTE LEIDAS REPRESENTAN
C     LAS CORRECCIONES SIMULTANEAS DE LA GEOMETRIA DURANTES TODOS
C     LOS PUNTOS DEL BARRIDO
C     -SOLO SE PERMITEN COMO MAXIMO CINCO TARJETAS DE VARIACIONES
C     SIMULTANEAS
C     -EN CADA TARJETA INDICAMOS TODOS LOS PARAMETROS SOMETIDOS A LA
C     MISMA VARIACION (PRIMERAS 30 COLUMNAS) Y LUEGO EL VALOR DE LA
C     VARIACION
C     -EL NUMERO MAXIMO DE PARAMETROS A VARIAR POR TARJETA ES DE 15
C     TENIENDO EN CUENTA QUE SI QUEREMOS VARIAR VARIOS PARAMETROS A
C     LA VEZ Y EN DISTINTAS CANTIDADES, HEMOS DE DESTINAR DOS CASI-
C     LLAS DEL CAMPO DE 30 A PONER UN 99 TRAS EL ULTIMO PARAMETRO
C     QUE HAYAMOS ESCRITO
C     -LOS PARAMETROS SE INDICARAN POR UN NUMERO QUE TIENEN ASOCIADO
C     Y QUE INDICA EL ORDEN DE LOS MISMOS DENTRO DE LA MATRIZ Z,
C     EMPEZANDO A NUMERARSE CONSECUTIVAMENTE POR COLUMNAS DE LA
C     CITADA MATRIZ EN EL ORDEN BL...ALPHA...BETA Y, DENTRO DE CADA
C     COLUMNA DE ARRIBA A ABAJO.
C     -SI QUEREMOS INDICAR LA VARIACION SIMULTANEA DE DOS GRUPOS DE
C     PARAMETROS (DOS TARJETAS DISTINTAS) SE HA DE PONER UN 99 DESPUES
C     DEL ULTIMO PARAMETRO DE LA PRIMERA TARJETA Y DENTRO DEL CAMPO
C     DESTINADO A LOS PARAMETROS, EL MISMO PROCESO SE SEGUIRA CON
C     TODAS LAS TARJETAS, EN CASO DE QUE SEAN MAS DE DOS, SALVO LA
C     ULTIMA DEL PAQUETE
C     -EL CAMPO DEDICADO A LOS PARAMETROS, PUEDE ACABAR, POR LOS MOTI-
C     VOS ANTES VISTOS EN 0,99 U OTRO NUMERO, SI TERMINA EN CERO U
C     OTRO NUMERO SE INTERPRETA COMO FINAL DE LAS VARIACIONES SIMUL-
C     TANEAS
C     *SE LEEN UNA SOLA VEZ, LOS DATOS ANTERIORMENTE INDICADOS DE
C     A) SCF
C     B) INTEGRALES, SALVO LAS EXCEPCIONES INDICADAS
C     C) CINI, NO SE LEE LA MATRIZ CINI SE CALCULA PORQUE SE TOMA
C     COMO MATRIZ DE PARTIDA LA DEL PUNTO ANTERIOR
C     D) Y E) CLOSED Y OPEN
C                                     *****
C X  ***                               ***
C     ***DATOS OPTIM***
C     ***                               ***
C     -** SI SE ELIGE EL METODO DE M-S:
C     *NUMERO ATOMICO, COORDENADAS X, Y, Z (UNA TARJETA POR ATOMO)
C     FORMATO I5,3D20,11
C     *TIPO DE ORBITAL, NUMERO DEL NUCLEO, COORDENADAS, EXPONENTE
C     FORMATO I2,IX,I2,3D15.8,D20,11
C     *PARAMETRO ROUTE PARA INDICAR QUE VALORES SE TOMAN PARA
    
```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

C LA CONVERGENCIA J
 C IROUTE=0--> SE TOMAN LOS VALORES STANDARD PARA IOPT(1) J
 C IROUTE=1--> SE LEEN LOS VALORES J
 C FORMATO I2 J
 C *CONVERGENCIA DEL GRADIENTE(IOPT(1)),CONVERGENCIA DE LA J
 C ENERGIA (IOPT(2)),SE LEEN DOS NUMEROS ENTEROS QUE REPRE- J
 C SENTAN EL VALOR DEL EXPONENTE DE LA POTENCIA DE J
 C 10,**(IOPT(1)) J
 C FORMATO 3I5 J
 C *NUMERO DE ATOMOS(CONSIDERADOS EN EL ORDEN DE ENTRADA) J
 C CUYAS COORDENADAS SE MINIMIZAN J
 C FORMATO I2 J

C-----J
 C-----J
 C DEFINIMOS LA FORMA DE LAS UNIDADES PERIFERICAS USADAS J
 C *****J

UNIDAD	TIPO	VARIABLE EN OPEN	VARIABLE EN CLOSED
=====	=====	=====	=====
1	SEC	PC	
2	SEC	PO	
3	SEC	A1	
4	SEC	A2	
5	SYS		
6	SYS		
7	SEC	B1	
8	SEC	T	T
9	SEC	(IJ/KL)	(IJ/KL)
10	SEC	B2	
11	SEC.	P2C	
12	SEC.	P2O1	
13	SEC		
14	SEC.	P2V	
15	SEC.	FC	
16	SEC.	FO1	
17	SEC.	FO2	
18	SEC.	S**(1/2)	
19	SEC.	S**(-1/2)	
20	SEC.	S	S
21	SEC.	H	H
22	SEC.	C	
23	SEC.	R	R
24			
25	SEC.	V	V
26	SEC.	P02	
27	SEC	CINTA DE SEGURIDAD PARA RESTART	

C-----J
 C-----J
 C DICCIONARIO DE LAS SUBROUTINAS J
 C *****J
 C ***SUBROUTINAS FTMAIN J
 C RUTA J
 C ***SUBROUTINAS RUTA J
 C OPTIM J
 C POINT J
 C SCAN J
 C ***SUBROUTINAS POINT J
 C COORIN J
 C PRINTZ J
 C SCF J

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```
C      *** SUBROUTINAS INTEGR
C      BIEIND
C      CFSG
C      CFST
C      CFSV
C      CFS2L
C      DIVPT
C      ELFNG
C      ELFNT
C      ELFNV
C      ELFN2L
C      FMCH
C      HFORM
C      ININTG
C      INTWR2
C      INTWRT
C      GINTS
C      GSGINT
C      GSMINT
C      GSTINT
C      GSVINT
C      MINTS
C      NORMLS
C      NOSYM
C      ORDER4
C      P4
C      PACK
C      RMAT1
C      ROTCS
C      ROTCS1
C      ROTMAT
C      SHFTCS
C      STVIND
C      SUMG
C      SUMT
C      SUMV
C      SUM2L
C      SYM
C      TINTS
C      VINTS
C      ***SUBROUTINAS GENERALES DE CALCULO MATRICIAL
C      COPY
C      DWRVEC
C      DWRMAT
C      EIGEND
C      INPUT
C      MMULD
C      MMULT
C      OUTPUT
C      SUM
C      TRAZA
C      ***SUBROUTINAS SCF***
C      CINI
C      DISTAN
C      ENEREP
C      EREPT
C      INSCF
C      INTNUC
C      ORSIM
C      REINI1
C      SCF
C      SNFORM
```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C   ***SUBROUTINAS COMUNES A CLOSED Y OPEN
C   ACEL
C   CDIAG
C   CRITER
C   RESULT
C   UNPACK
C   ***SUBROUTINAS CLOSED
C   CLOSED
C   CGFORM
C   ENERGY
C   FFORMC
C   PRINTC
C   REINI1
C   RMAT
C   STOP1
C   ***SUBROUTINAS OPEN
C   ALFBET
C   DENMAT
C   FFORMO
C   FDIFER
C   INORHF
C   MATAUX
C   ODIAG
C   OENERG
C   OGFORM
C   OPEN
C   PICLO
C   PIOP1
C   PIOP2
C   PRINTO
C   ROFORM
C   RTFORM
C   TFORM
C   ***SUBROUTINAS DEL BARRIDO DE POTENCIAL
C   BUILDZ
C   COORIN
C   PRINTZ
C   SCAIN
C   SCAN
C   SCF
C   PROD
C   VEC
C   ZSCALE
C   ***SUBROUTINAS DE OPTIMIZACION GEOMETRICA
C   OPTIM
C   *****
C   -----
C   LISTA DE COMMONS PRINCIPALES
C   *****
C   COMMON NUMORB,NR,NW,NT
C   COMMON/C1/DNUCL,IZ,NUMNUC
C   COMMON/C2/NOC,NPE
C   COMMON/C3/EPS,EPSENT,EPSNO,EPSCO
C   COMMON/C4/TIPO
C   COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
C   COMMON/C6/ALFA,BETA
C   COMMON/C11/DBORB,NNUCL(30),ITORB(30)
C   DIMENSION DNUCL(5,3),DBORB(30,4),NOC(30),IZ(5)
C   *****
C   *****

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C   PROGRAMA PRINCIPAL
C
C   *****
C
C   DEFINICION DE LOS ARCHIVOS
C   ****          ****          ****          ****          ****          ****          ****
C   OPTION FILE(1)
C   OPTION FILE(2)
C   OPTION FILE(3)
C   OPTION FILE(4)
C   OPTION FILE(7)
C   OPTION FILE(8)
C   OPTION FILE(9)
C   OPTION FILE(10)
C   OPTION FILE(11)
C   OPTION FILE(12)
C   OPTION FILE(13)
C   OPTION FILE(14)
C   OPTION FILE(15)
C   OPTION FILE(16)
C   OPTION FILE(17)
C   OPTION FILE(18)
C   OPTION FILE(19)
C   OPTION FILE(20)
C   OPTION FILE(21)
C   OPTION FILE(22)
C   OPTION FILE(23)
C   OPTION FILE(24)
C   OPTION FILE(25)
C   OPTION FILE(26)
C   OPTION FILE(27)
C   ****          ****          ****          ****          ****          ****          ****
C
C   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C   COMMON NUMORB,NR,NW,NT
C   COMMON/START/NNRNW
C   COMMON/CI/DNUCL(10,3),IZ(10),NUMNUC
C   DIMENSION TITOL(10)
C
C
C   LEEMOS LOS DATOS DEL PROBLEMA A TRATAR
C
C   *** EL NUMERO LOGICO DE LA LECTORA ES EL 5
C
C   LEEMOS LOS NUMEROS DE LAS UNIDADES DE LECTURA Y ESCRITURA
C   NR=5
C   NW=6
C   NNRNW=27
C   WRITE(NW,10)
10  FORMAT(1H1/41X,52(1H*)/
C   *41X,1H*,50X,1H*/
C   *41X,1H*,10X,'PROGRAMA DE CALCULO AB-INITIO',10X,1H*/
C   *41X,1H*,50X,1H*/
C   *41X,1H*,19X,'(LCAO-MO-SCF)',18X,1H*/
C   *41X,1H*,50X,1H*/
C   *41X,1H*,5X,'PARA EL CALCULO DE SISTEMAS MOLECULARES',6X,1H*/
C   *41X,1H*,50X,1H*/
C   *41X,1H*,19X,'O   ATOMICOS',18X,1H*/
C   *41X,1H*,50X,1H*/
C   *41X,1H*,11X,'EN CAPAS CERRADAS O ABIERTAS',11X,1H*/
C   *41X,1H*,50X,1H*/
C   *41X,1H*,9X,'POR APLICACION DE UN METODO RHF',10X,1H*/

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

*41X,1H*,50X,1H*/
*41X,1H*,10X,'-----',9X,1H*/
*41X,1H*,2X,'PROGRAMADO EN EL DEPARTAMENTO DE QUIMICA FISICA',1X,1H*/
**/
*41X,1H*,50X,1H*/
*41X,1H*,12X,'GRUPO DE QUIMICA-CUANTICA',13X,1H*/
*41X,1H*,50X,1H*/
*41X,1H*,10X,'DE LA UNIVERSIDAD DE BARCELONA',10X,1H*/
*41X,1H*,50X,1H*/
*41X,1H*17X,'EN MARZO DE 1979',17X,1H*/
*41X,1H*,50X,1H*/
*41X,52(1H*)/////

```

```

C
C
C LEEMOS LA RUTA A SEGUIR
C

```

```

    READ(NR,20)IOPT
    GO TO (1,1,1,1,1,2,2),IOPT
1 CONTINUE
    READ(5,20)NW
    WRITE(27,70)NR,NW
    READ(NR,40)TITOL
    WRITE(NW,60)(TITOL(I),I=1,10)
    WRITE(27,40)(TITOL(I),I=1,10)

```

```

C*
C LEEMOS EL NUMERO DE ORBITALES DE BASE (NUMORB) Y EL DE NUCLEOS (
C NUMNUC)

```

```

    READ(NR,70)NUMNUC,NUMORB
    WRITE(27,70)NUMORB,NUMNUC

```

```

C CALCULAMOS NT
    NT=(NUMORB*NUMORB+NUMORB)/2
    WRITE(NW,190)NW
    WRITE(NW,30)NUMORB,NUMNUC

```

```

C 2 CONTINUE
C REALIZAMOS UN PROCESO AUTOCONSISTENTE
    CALL RUTA (IOPT)

```

```

    STOP

```

```

20 FORMAT(I2)
30 FORMAT(1H , 'NUM. ORBITALES=',I2,10X, 'NUM. DE NUCLEOS=',
* I2////)

```

```

40 FORMAT(10A8)

```

```

60 FORMAT(1H1,120(1H*)/1H ,10A8/120(1H*)//)

```

```

70 FORMAT(2I2)

```

```

190 FORMAT(1H , '**** SE IMPRIME POR EL PERIFERICO ',I2, '****'////)

```

```

    END

```

```

C ELEMENT JNVS0107
C SUBROUTINE RUTA(IOPT)

```

```

C SUBROUTINA PARA GESTIONAR LAS POSIBLES UTILIZACIONES DEL PAQUETE DE
C PROGRAMAS I N I T I O .

```

```

C INDICA LOS CALCULOS A HACER MEDIANTE LA LECTURA DE UNA
C FICHA DE CONTROL

```

```

C LA FORMA DE LA GESTION ES MEDIANTE UN COMMON /A/ DE ESTA FORMA:

```

```

    COMMON/A/IWAY(10)

```

```

C DONDE CADA ELEMENTO DEL VECTOR IWAY TIENE ESTE SIGNIFICADO:

```

```

    *IWAY(1)=0 RUTA NORMAL EN OPEN

```

```

    *IWAY(1)=1 RESTART SOBRE EL GRUPO OPEN

```

```

    *IWAY(2)=0 RUTA NORMAL EN SCF

```

```

    *IWAY(2)=1 RESTART SOBRE EL GRUPO SCF

```

```

C *IWAY(3) : VARIABLE PARA LA LECTURA Y ESCRITURA DE LOS RESULTA-
C DOS DENTRO DE SCF

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C          =0 SE LEEN LOS DATOS NORMALMENTE Y SE ESCRIBEN          J
C          =1 NO SE LEEN LOS DATOS DE LOS NUCLEOS Y ORBITALES      J
C      *IWAY(4)=0 RUTA NORMAL EN SCF                                J
C      *IWAY(4)=1 SOLO SE CALCULAN LAS INTEGRALES                  J
C      *IWAY(5)=0 COORDENADAS CARTESINAS PARA LOS DATOS DE LOS    J
C          NUCLEOS                                                 J
C      *IWAY(5)=1 COORDENADAS INTERNAS, ASIGNADAS AUTOMATICA-    J
C          MENTE EN CASO DE BARRIDO DE POTENCIAL U                 J
C          OPTIMIZACION GEOMETRICA                                 J
C      *IWAY(6)                                                    J
C      *IWAY(7)                                                    J
C      *IWAY(8)                                                    J
C      *IWAY(9)                                                    J
C      *IWAY(10)                                                   J
C
C      DATOS DE ENTRADA:
C      *TIPO DE CALCULO, EN LA VARIABLE IOPT, EL FORMATO ES I2
C
C      -----
C      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C      COMMON NUMORB, NR, NW, NT
C      COMMON/A/IWAY(10)
C      COMMON/START/NNRNW
C      COMMON/C1/DNUCL(10,3), IZ(10), NUMNUC
C      COMMON/C4/TIPO
C      WRITE(NW,103)
C      WRITE(NW,102)
C
C      INICIALIZAMOS A CERO EL CONTROL DE LA RUTA
C
C      DO 20 I=1,10
C 20 IWAY(I)=0
C
C      REALIZACION DEL CALCULO ELEGIDO
C
C      GO TO (1,2,3,4,5,6,7), IOPT
C      CALCULO SCF
C 1 CONTINUE
C   WRITE(NW,101)
C   WRITE(NW,102)
C   CALL POINT
C   RETURN
C      OPTIMIZACION
C 2 CONTINUE
C   WRITE(NW,104)
C   WRITE(NW,102)
C   IWAY(3)=1
C   CALL MS
C   RETURN
C      BARRIDO
C 3 CONTINUE
C   WRITE(NW,105)
C   WRITE(NW,102)
C   IWAY(5)=1
C   NSCAN=0
C   CALL SCAN(NSCAN)
C   RETURN
C      OPTIMIZACION+BARRIDO
C 4 CONTINUE
C   WRITE(NW,106)
C   WRITE(NW,102)

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

CALL OPTIM
NSCAN=1
CALL SCAN(NSCAN)
RETURN
C  CALCULO DE INTEGRALES
5  CONTINUE
WRITE(NW,107)
WRITE(NW,102)
IWAY(4)=1
CALL POINT
RETURN
C  RESTART SOBRE SCF
6  CONTINUE
IWAY(2)=1
WRITE(NW,109)
WRITE(NW,102)
CALL SCF
RETURN
C  RESTART SOBRE CAPAS ABIERTAS-CAPAS CERRADAS RHF
7  CONTINUE
IWAY(1)=1
READ(NR,108)TIPO
WRITE(NW,110)
WRITE(NW,102)
CALL SCF
RETURN
100 FORMAT(I2)
101 FORMAT(1H , 'CALCULO AUTOCONSISTENTE DE UN PUNTO' /)
102 FORMAT(1H ,120(1H*))
103 FORMAT(1H1)
104 FORMAT(1H , 'OPTIMIZACION DE GEOMETRIA' /)
105 FORMAT(1H , 'BARRIDO DE POTENCIAL' /)
106 FORMAT(1H , 'OPTIMIZACION DE GEOMETRIA+BARRIDO DE POTENCIAL' /)
107 FORMAT(1H , 'CALCULO DE LAS INTEGRALES ' /)
108 FORMAT(A8)
109 FORMAT(1H , 'RESTART SOBRE SCF' /)
110 FORMAT(1H , 'RESTART 00&R& CLOSED-OPEN' /)
END
ELEMENT S0407
SUBROUTINE OPTIM
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
WRITE(NW,100)
RETURN
100 FORMAT(1H1, 'OPCION SIN EFECTO EN EL MOMENTO')
END
C  ELEMENT JNVS0501
SUBROUTINE POINT
C  CALCULO SCF ORHF,CRHF
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/A/IWAY(10)
COMMON/START/NNRNW
COMMON/C1/DNUCL,IZ,NUMNUC
COMMON/C4/TIPO
DIMENSION DNUCL(10,3),IZ(10)
DIMENSION INUCL(30)
DATA INUCL/' H','HE','LI','BE',' B',' C',' N',' O',' F','NE','NA'
*,'MG','AL','SI',' P',' S','CL','AR',' K','CA','SC','TI',' V','CR'
*,'MN','FE','CO','NI','CU','ZN'/

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C LEEMOS UNA VARIABLE PARA SABER SI LOS DATOS DE LOS NUCLEOS SE LEEN
C EN COORDENADAS CARTESIANAS O INTERNAS
C SI IREAD=0--> COORDENADAS CARTESIANAS
C SI IREAD=1--> COORDENADAS INTERNAS
C READ(NR,100)IREAD
C LECTURA DE LAS COORDENADAS DEL PUNTO A CALCULAR
C
C IF(IREAD=0)1,2,1
CCC CARTESIANAS
2 CONTINUE
WRITE(NW,103)
DO 10 I=1,NUMNUC
10 READ(NR,101)IZ(I),(DNUCL(I,J),J=1,3)
WRITE(NW,80)
DO 7 J=1,NUMNUC
WRITE(27,101)IZ(I),(DNUCL(I,J),J=1,3)
II=IZ(I)
7 WRITE(NW,102)I,INUCL(II),IZ(I),(DNUCL(I,J),J=1,3)
GO TO 3
CCC INTERNAS
1 CONTINUE
WRITE(NW,104)
CALL COORIN
CALL PRINTZ
3 CONTINUE
C REALIZACION DE LA AUTOCONSISTENCIA
CALL SCF
RETURN
80 FORMAT(///1H ,,DATOS DE LOS NUCLEOS//1H ,5X,,NUM,,1X,,TIPO,,1X,,CU
*ARGA',6X,'COORDENADA X',10X,'COORDENADA Y', 10X,'COORDENADA Z'/1H
*,5X,'*** **** *****',5X,3(20(1H*),2X))
100 FORMAT(I2)
101 FORMAT(I5,3D20,11)
102 FORMAT(6X,I2,3X,A2,3X,I2,7X,3(D15,8,7X))
103 FORMAT(//1H ,,'SE LEEN EN COORDENADAS CARTESIANAS'///)
104 FORMAT(//1H ,,'SE LEEN EN COORDENADAS INTERNAS'///)
END
C ELEMENT JNVS0609
SUBROUTINE SCF
C
C ESTA SUBRUTINA LLEVA A CABO LA GESTION DE UN CALCULO AUTOCON-
C SISTENTE DEL TIPO AB=INITIO
C
C LOS DATOS DE ENTRADA SON:
C -NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
C -PRECISION EN LA CONVERGENCIA DE CADA UNO DE LOS PROCESOS:
C -TIPO DE CALCULO A REALIZAR,CON ESTAS POSIBILIDADES:
C -SI INC=1-->SE LEE LA MATRIZ C (FORMATO 4D20,13)
C LA MATRIZ SE LEE POR BLOQUES(VER INPUT)DE CUATRO COLUMNAS,DE
C FORMA QUE INTRODUCIMOS PRIMERO TODAS LAS FILAS DE UN BLOQUE YJ
C LUEGO LAS FILAS DEL SIGUIENTE,ETC.
C EL FORMATO ES 4(D20,13)
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C ARCHIVOS USADOS EN ESTE GRUPO
C
C -----
C NUMERO TIPO UTILIDAD
C *****
C 9 SEC, INT, BIELECTR,
C 18 SEC MAT. S*(-1/2)
C 19 SEC MAT S*(1/2)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C      20      SEC,      SUPERV, S
C      21      SEC,      SUPERV, H
C      22      SEC,      MAT, C INICIAL
C      23      SEC,      MAT, DE DENS.(0)
C      *****
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON NUMORB,NR,NW,NT
      COMMON/A/IWAY(10)
      COMMON/START/NNRNW
      COMMON/ACELE/IACEL
      COMMON/C1/DNUCL,IZ,NUMNUC
      COMMON/C2/ANOC(30),NPE
      COMMON/C20/NOC
      COMMON/C3/EP,EPSENT,EPSENO,EPSCOE
      COMMON/C4/TIPO
      COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
      COMMON/C6/ALFA(2,2),BETA(2,2)
      COMMON/C7/H(465),T(465)
      COMMON/C8/C(30,30)
      COMMON/C10/A(30,30),OM(465)
      COMMON/C11/DBORB,NNUCL(30),ITORB(30)
      COMMON/C12/ENO(30),E
      COMMON/C13/R(30,30)
      COMMON/C16/NOPEN1,NOPEN2,NCLD,NOC1,NOC2
      COMMON/C17/NOPSHL
      COMMON/C19/VECTO(465)
      COMMON/C20/I,IJ(500),IKL(500),VALINT(500)
      DIMENSION DNUCL(10,3),DBORB(30,4),NOC(30),IZ(10)
      DATA OPENR/, ORHF,/
C*
C      VARIABLES PARA LA INDICACION DE LA RUTA
      IREAD=IWAY(3)
      IF(IWAY(2),EQ,1)GO TO 1000
      IF(IWAY(1),EQ,1)GO TO 1002
      GO TO 1004
1000 CONTINUE
      CALL REINI1
      GO TO 1001
1004 CONTINUE
C*
C      CALCULO DE LAS INTEGRALES
C*
      CALL INTEGR
      IF(IWAY(4),EQ,1)CALL STOP1
1001 CONTINUE
C*
C      ENTRADA DE LOS DATOS PARA EL PROCESO SCF
C*
      IF(IREAD,NE,0)GO TO 1
      CALL INSCF
1 CONTINUE
C*
C      CALCULAMOS LA MATRIZ S**(1/2) Y S**(-1/2)
C*
      CALL ORSIM(TIPO,IW)
C*
C      CALCULAMOS O LEEMOS LA MATRIZ C INICIAL SEGUN EL VALOR DE INC
C*
C      EN LOS BARRIDOS U OPTIMIZACION,SE TOMA LA MATRIZ DE COEFICIENTES
C      CALCULADA EN EL PUNTO ANTERIOR
      DO 4 I=1,NUMORB
4 ANOC(I)=0,D00

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

IF(IREAD,NE,0)GO TO 2
CALL CINI(INC,IW)
2 CONTINUE
C*
C CALCULAMOS LA INTEGRAL DE REPULSION INTERNUCLEAR TOTAL
C*
VNN=0,DO
IF(NUMNUC,EQ,1)GO TO 3
CALL INTNUC(VNN)
3 CONTINUE
1003 CONTINUE
C
C CALCULAMOS LA ENERGIA ELECTRONICA TOTAL PARA UNA POSICION DE LOS
C NUCLEOS(APROX. BORN-OPPENHEIMER)
C
C SE ESTUDIAN LOS ESTADOS ELECTRONICOS CON CAPAS CERRADAS (TIPO=CRHF)
C )Y LOS ESTADOS ELECTRONICOS CON CAPAS ABIERTAS (TIPO=ORHF)
C
1002 CONTINUE
IF(TIPO,EQ,OPENR)GO TO 50
CALL CLOSED(VNN)
RETURN
50 CONTINUE
CALL OPEN(VNN)
RETURN
100 FORMAT(2(2D15,8))
END
C ELEMENT JNVS0605
SUBROUTINE INSCF
C
C ENTRADA DE DATOS PARA EL PROCESO AUTOCONSISTENTE EN CUALQUIERA DE
C SUS VARIETADES
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/ACELE/IACEL
COMMON/C3/EPS,ESENT,ESENO,EPSOE
COMMON/C4/TIPO
COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
NC=27
WRITE(NC,190)
IACEL=0
C
C .....
C ENTRADA DE DATOS PARA LA AUTOCONSISTENCIA
C .....
C NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES
C VARIABLES PARA EL CONTROL DE LA ESCRITURA
READ(NR,180)NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
WRITE(NC,130)NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
C LIMITE DE CONVERGENCIA EN LAS DIAGONALIZACIONES(EPS)EN LA ENERGIA
C ELECTRONICA(ESENT) EN LAS ENERGIAS ORBITALES (ESENO) EN LOS ELE-
C MENTOS DE LA MATRIZ DE DENSIDAD (EPSOE)
READ(NR,60)EPS,ESENT,ESENO,EPSOE
WRITE(NC,60)EPS,ESENT,ESENO,EPSOE
READ(NR,140)TIPO
WRITE(NC,140)TIPO
READ(NR,70)IACEL
WRITE(NC,70)IACEL
C
C .....
C ESCRITURA DE LOS DATOS
C .....
WRITE(NW,30)NUMITE

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

WRITE(NW,40)EPS,EPSENT,EPSENO,EPSCOE
WRITE(NW,50)NNN,IR,INR,INC,IW
WRITE(NW,150)TIPO
WRITE(NW,80)IACEL
RETURN
30 FORMAT(////,1H,5X,'EL NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES ES DE ',I3)
40 FORMAT(1H,5X,'LIMITE DE CONVERGENCIA EN LAS DIAGONALIZACIONES=',D7,1/6X,
*7,1/6X,'LIMITE DE CONVERGENCIA EN LA ENERGIA ELECTRONICA=',D7,1/6X,
*,'LIMITE DE CONVERGENCIA EN LAS ENERGIAS ORBITALES=',D7,1/6X,'LIMI
*TE DE CONVERGENCIA EN LOS ELEMENTOS DE LA MATRIZ DENSIDAD=',D7,1)
50 FORMAT(1H,5X,'CONTROL DE PROGRAMA'//9X,'NNN=',I1/9X,'IR=',I1/9X,
*,'INR=',I1/9X,'INC=',I1/9X,'IW=',I1/9X)
60 FORMAT(4(D15,8,5X))
70 FORMAT(I1)
80 FORMAT(1H,5X,'EL CRITERIO PARA LA ACELERACION ES ',I1/)
130 FORMAT(6I2)
140 FORMAT(A8)
150 FORMAT(1H,'*** EL TIPO DE CALCULO REALIZADO ES ',A8,' SHELL')
180 FORMAT(40I2)
190 FORMAT('DATOS SCF ')
END
C ELEMENT JNVS0607
C ELEMENT JNVS0601
SUBROUTINE CINI(INC,IW)
C
C LECTURA O CALCULO DE LA MATRIZ C INICIAL, EN ESTE ULTIMO CASO
C SE REALIZA UN METODO EXTENDED-HUCKEL
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/C2/ANOC(30),NPE
COMMON/C3/EPS,EPSENT,EPSENO,EPSCOE
COMMON/C8/C
COMMON/C10/A(30,30),AUX(465)
COMMON/C19/H(465)
DIMENSION C(30,30)
C*
C SEGUN CUAL SEA EL VALOR DE INC LEEMOS C O CALCULAMOS C A PARTIR
C DE H,
C SI INC=0 CALCULAMOS C
C SI INC=1 LEEMOS C
C
IF(INC,EQ,0)GO TO 2
C,, LECTURA DE C POR LA LECTORA
1 CALL INPUT(NUMORB,C,NR)
WRITE(NW,100)
CALL OUTPUT(NUMORB,C,NW)
GO TO 3
C,, CALCULO DE C POR DIAGONALIZACION DE H
C H ES CONOCIDA POR EL COMMON C19
2 CONTINUE
LI=1
CALL COPY(A,H,NUMORB,LI)
MV=0
CALL EIGEND(A,C,NUMORB,MV,EPS)
WRITE(NW,100)
CALL OUTPUT(NUMORB,C,NW)
DO 4 I=1,NUMORB
4 ANOC(I)=A(I,I)
3 CONTINUE
C*
C ESCRIBIMOS C EN EL PERIFERICO 22

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

      IMAT=0
      NP=22
      CALL DWRMAT(NP,C,IMAT)
      RETURN
100  FORMAT(1H ,40X, 'MATRIZ C INICIAL'//)
      END
      SUBROUTINE ORSIM(TIPO,IW)
C     CALCULO DE LAS MATRICES S**(-1/2) Y S**(1/2)
C     COMO DATO DE ENTRADA SE NECESITA LA MATRIZ S (LEIDA DE 20)
C     COMO RESULTADO SE OBTIENE S**(-1/2) (EM 18) Y S**(1/2) (19)
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON NUMORB,NR,NW,NT
      COMMON/A,IWAY(10)
      COMMON/C3/EPS,EPSENT,EPSEND,EPSCOE
      COMMON/C8/D(30,30)
      COMMON/C10/V(30,30),VECTO(465)
      COMMON/C13/S(30,30)
      DATA CLASE/' CRHF'/
C     LEEMOS EL NUMERO DE INTEGRALES
      READ(20,108)NINTS
C     LECTURA DE S(VECTO)
      NP=20
      READ(NP,109)(VECTO(I),I=1,NT)
      REWIND 20
      IF(IWAY(3),NE,0)GO TO 2
      WRITE(NW,106)
      WRITE(NW,107)(VECTO(I),I=1,NT)
      2 CONTINUE
C     DIAGONALIZACION DE S
      LI=1
      CALL COPY(D,VECTO,NUMORB,LI)
      MV=0
      CALL EIGEND(D,V,NUMORB,MV,EPS)
CCC S**(-1/2)
      EXP=-0,5
      CALL SNFORM(EXP)
      WRITE(NW,104)
      IF(IWAY(3),NE,0)GO TO 4
      CALL OUTPUT(NUMORB,S,NW)
      4 CONTINUE
      DO 1 I=1,NUMORB
      WRITE(18)(S(I,J),J=1,NUMORB)
      1 CONTINUE
      ENDFILE 18
      REWIND 18
      IF(TIPO,E0,CLASE)GO TO 7
CCC S**(1/2)
      EXP=0,5
      CALL SNFORM(EXP)
      WRITE(NW,105)
      IF(IWAY(3),NE,0)GO TO 5
      CALL OUTPUT(NUMORB,S,NW)
      5 CONTINUE
      DO 3 I=1,NUMORB
      3 WRITE(19)(S(I,J),J=1,NUMORB)
      ENDFILE 19
      REWIND 19
      7 CONTINUE
      RETURN

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

104 FORMAT(/1H ,40X,'MATRIZ S**(-1/2)')
105 FORMAT(/1H ,40X,'MATRIZ S**(1/2)')
106 FORMAT(/1H ,40X,'SUPERVECTOR S;')
107 FORMAT(7(1H ,D15,8,2X))
108 FORMAT(I10)
109 FORMAT(15D15,8)
END
C ELEMENT JNVS0610
SUBROUTINE SNFORM(EXP)
C
C SUBROUTINA AUXILIAR PARA EL CALCULO DE S**(EXP)
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/A/IWAY(10)
COMMON/C8/D
COMMON/C10/V(30,30),VECTO(465)
COMMON/C13/SEXPI(30,30)
DIMENSION SF(30,30),D(30,30),S(30,30)
C SE CONOCE LA MATRIZ DE LOS VALORES PROPIOS DE S(D) Y DE LOS VECTORES
C PROPIOS DE S(V) A TRAVES DE LOS COMMON
DO 10 I=1,NUMORB
DO 11 J=1,NUMORB
11 S(I,J)=0,DO
10 CONTINUE
C
C CALCULO DE S**(EXP) A PARTIR DE LA MATRIZ S DIAGOLALIZADA(D),
C
DO 1 I=1,NUMORB
1 S(I,I)=DSQRT(D(I,I))
IF(EXP,GT,0,)GO TO 3
DO 2 I=1,NUMORB
2 S(I,I)=1,DO/S(I,I)
3 CONTINUE
C OBTENCION DE LA MATRIZ TRANSPUESTA DE LOS VECTORES PROPIOS
DO 4 I=1,NUMORB
DO 5 J=1,NUMORB
5 SF(I,J)=V(J,I)
4 CONTINUE
C OBTENCION EFECTIVA DE LA MATRIZ S**(EXP) COMO:
C S**(EXP)=V*S*SF
C V:MATRIZ DE LOS VECTORES PROPIOS DEL RECUBRIMIENTO
C S:MATRIZ DE LOS VALORES PROPIOS,ELEVADA A N,DEL RECUBRIMIENTO
C SF:MATRIZ TRANSPUESTA DE E
C
CALL MMULD(V,S,SEXPI,NUMORB)
CALL MMULD(SEXP,SF,V,NUMORB)
DO 6 I=1,NUMORB
DO 7 J=1,NUMORB
7 SEXP(I,J)=V(I,J)
6 CONTINUE
RETURN
END
C ELEMENT JNVS0606
SUBROUTINE INTNUC(ERP)
C
C CALCULO DE LA ENERGIA TOTAL DE REPULSION NUCLEAR Y DE LAS DISTAN-
C CIAS INTERNUCLEARES
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW
COMMON/C1/DNUCL(10,3),IZ(10),NUMNUC

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```
DIMENSION A(10,10)
```

```
C
C
C CALCULO DE LAS DISTANCIAS INTERNUCLEARES Y ALMACENAMIENTO EN EL
C EN EL TRIANGULO INFERIOR DE LA MATRIZ A (EXCEPTO EN LA DIAGONAL
C PRINCIPAL)
```

```
CALL DISTAN(A,DNUCL,NUMNUC)
```

```
C
C CALCULO DE LAS ENERGIAS DE REPULSION INTERNUCLEARES Y ALMACENA-
C MIENTO EN EL TRIANGULO SUPERIOR DE LA MATRIZ A (EXCEPTO EN LA
C DIAGONAL PRINCIPAL)
```

```
CALL ENEREP(A,IZ,NUMNUC)
```

```
C
C CALCULO DE LA ENERGIA TOTAL DE REPULSION INTERNUCLEAR
```

```
CALL EREPT(A,ERPN,NUMNUC)
```

```
WRITE(NW,100)ERPN
```

```
WRITE(NW,103)
```

```
NUMN1=NUMNUC-1
```

```
WRITE(NW,102)(I,I=1,NUMN1)
```

```
DO 1 I=2,NUMNUC
```

```
  I1=I-1
```

```
  WRITE(NW,101)I,(A(I,J),J=1,I1)
```

```
1 CONTINUE
```

```
RETURN
```

```
100 FORMAT(///1H ,10X,' ENERGIA DE REPULSION INTERNUCLEAR =',D15,8,' A
*,U, '/')
```

```
101 FORMAT(1H ,10X,I2,5X,10(D10,4,2X))
```

```
102 FORMAT(1H ,17X,10(5X,I2,5X))
```

```
103 FORMAT(1H ,10X,'MATRIZ DE DISTANCIAS INTERNUCLEARES'//)
```

```
END
```

```
C ELEMENT JNVS0602
```

```
SUBROUTINE DISTAN(A,DNUCL,NUMNUC)
```

```
C
```

```
C CALCULO DE LAS DISTANCIAS INTERNUCLEARES
```

```
C
```

```
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
```

```
DIMENSION A(10,10),DNUCL(10,3)
```

```
DO 1 N1=2,NUMNUC
```

```
  K=N1-1
```

```
  DO 1 N2=1,K
```

```
    DIST=0,D0
```

```
    DO 2 I=1,3
```

```
      E=DNUCL(N1,I)-DNUCL(N2,I)
```

```
2 DIST=DIST+E*E
```

```
1 A(N1,N2)=DSQRT(DIST)
```

```
RETURN
```

```
END
```

```
C ELEMENT JNVS0603
```

```
SUBROUTINE ENEREP(A,IZ,NUMNUC)
```

```
C
```

```
C CALCULO DE LA ENERGIA DE REPULSION NUCLEAR A(N2,N1)=CARGA(N2)*
```

```
C
```

```
C CARGA(N1)/DISTANCIA(N2,N1)
```

```
C
```

```
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
```

```
DIMENSION A(10,10),IZ(10)
```

```
DO 1 N1=2,NUMNUC
```

```
  K=N1-1
```

```
  DO 1 N2=1,K
```

```
    ER=IZ(N1)*IZ(N2)/A(N1,N2)
```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

1 A(N2,N1)=ER
  RETURN
  END
C  ELEMENT JNVS0604
  SUBROUTINE EREPT(A,ERPNUM,NUMNUC)
C
C  CALCULO DE LA ENRGIA DE REPULSION INTERNUCLEAR TOTAL
C
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  DIMENSION A(10,10)
  ERPNUM=0.0
  DO 1 N1=2,NUMNUC
    K=N1-1
    DO 1 N2=1,K
1  ERPNUM=ERPNUM+A(N2,N1)
  RETURN
  END
C  ELEMENT JNVS0108
  SUBROUTINE SUM(A,B,N)
C  SUBROUTINA PARA SUMAR DOS MATRICES ---->A+B=C
C  LAS DIMENSIONES DE TODAS LAS MATRICES SON (N,N)
C
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  DIMENSION A(30,30),B(30,30)
C
  DO 10 I=1,N
  DO 11 J=1,N
11 A(I,J)=A(I,J)+B(I,J)
10 CONTINUE
  RETURN
  END
C  ELEMENT JNVS1501
  SUBROUTINE MMULT(A,B,C,D,N)
C  SUBROUTINA PARA MULTIPLICAR A*B*C=D
C  TODAS SON MATRICES CUADRADAS DE DIMENSION N
C
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  DIMENSION A(30,30),B(30,30),C(30,30),D(30,30)
  DIMENSION AU(30,30)
  CALL MMULD(A,B,AU,N)
  CALL MMULD(AU,C,D,N)
  RETURN
  END
C  ELEMENT JNVS0110
  SUBROUTINE MMULD(A,B,C,N)
C  SUBROUTINA PARA MULTIPLICAR MATRICES CUADRADAS ---->A*B=C
C
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  DIMENSION A(30,30),B(30,30),C(30,30)
C
  DO 1 I=1,N
  DO 2 J=1,N
    C(I,J)=0.0
  DO 3 K=1,N
3  C(I,J)=C(I,J)+A(I,K)*B(K,J)
2  CONTINUE
1  CONTINUE
  RETURN
  END
C  ELEMENT JNVS0103
  SUBROUTINE DWRVEC(NP,VECTOA,ITIPO)
C

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C SUBROUTINA PARA LEER O ESCRIBIR UN VECTOR SOBRE EL PERIFERICO NP
C * SI ITIPO=0--->SE ESCRIBE
C * SI ITIPO=1--->SE LEE
C
C

```

```

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
DIMENSION VECTOA(465)

```

```

C IF(ITIPO,EQ,1)GO TO 10
C

```

```

WRITE(NP)(VECTOA(I),I=1,NT)
ENDFILE NP
REWIND NP
RETURN

```

```

C -----
C 10 CONTINUE
READ(NP)(VECTOA(I),I=1,NT)
REWIND NP
RETURN
END

```

```

C ELEMENT JNVS0102
SUBROUTINE DWRMAT(NP,A,ITIPO)

```

```

C SUBROUTINA PARA LEER O ESCRIBIR UNA MATRIZ SOBRE EL PERIFERICO NP
C * SI ITIPO=0--->SE ESCRIBE
C * SI ITIPO=1--->SE LEE
C

```

```

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
DIMENSION A(30,30)

```

```

C IF(ITIPO,EQ,1)GO TO 1
C

```

```

C DO 10 I=1,NUMORB
10 WRITE(NP)(A(I,J),J=1,NUMORB)
ENDFILE NP
REWIND NP
RETURN
1 CONTINUE

```

```

C -----
C

```

```

C LECTURA DE UNA MATRIZ ALMACENADA EN UN DISCO
C

```

```

C DO 20 I=1,NUMORB
20 READ(NP)(A(I,J),J=1,NUMORB)
REWIND NP
RETURN
END

```

```

C ELEMENT JNVS0105
SUBROUTINE INPUT(IND,A,NR)

```

```

C GRUPO DE SUBROUTINAS PARA LA ENTRADA Y SALIDA DE MATRICES POR LOS
C ELEMENTOS DE INPUT Y OUTPUT DEL ORDENADOR
C

```

```

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION A(30,30)

```

```

C CON ESTA SUBROUTINA LEEMOS UNA MATRIZ EN BLOQUES DE J COLUMNAS EN
C FORMATO 4D20,13
C

```

```

C J2=0

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

      IF(IND,LT,4)GO TO 2
      N=IND/4
      DO 1 I=1,N
      J1=J2+1
      J2=J1+3
      DO 5 K=1,IND
5     READ(NR,100)(A(K,J),J=J1,J2)
1     CONTINUE
      IF(J2,EQ,IND)GO TO 3
2     J1=J2+1
      DO 4 K=1,IND
4     READ(NR,100)(A(K,J),J=J1,IND)
3     CONTINUE
      RETURN
100  FORMAT(4D20,13)
      END
C     ELEMENT JNVS0101
      SUBROUTINE COPY(AM,V,N,LI)
C     SUBROUTINA PARA TRANSFORMAR UNA MATRIZ CUADRADA SIMETRICA EN SU
C     SUPERVECTOR O VICEVERSA
C     *SI LI=0--->SE TRANSFORMA LA MATRIZ EN EL VECTOR
C     *SI LI=1--->SE TRANSFORMA EL VECTOR EN LA MATRIZ
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON NUMORB,NR,NW,NT
      DIMENSION V(465),AM(30,30)
C
      IF(LI,EQ,1)GO TO 2
CCC  LI=0 ---> TRANSFORMAMOS LA MATRIZ CUADRADA Y SIMETRICA AM EN EL
C     VECTOR V EN EL QUE GUARDAMOS SOLO LOS ELEMENTOS DEL TRIANGULO INFE-
C     RIOR.
1     CONTINUE
      K=0
      DO 10 I=1,N
      DO 15 J=1,I
      K=K+1
15    V(K)=AM(I,J)
10    CONTINUE
      IF(K,NE,NT)GO TO 50
      RETURN
CCC  LI=1 ---> TRANSFORMAMOS EL VECTOR V EN EL QUE TENEMOS ALMACENADOS
C     LOS ELEMENTOS DEL TRIANGULO INFERIOR DE LA MATRIZ AM EN LA CITADA
C     MATRIZ CUADRADA Y SIMETRICA.
2     CONTINUE
      K=0
      DO 20 I=1,N
      DO 21 J=1,I
      K=K+1
      AM(I,J)=V(K)
      IF(I,EQ,J)GO TO 22
      AM(J,I)=AM(I,J)
22    CONTINUE
21    CONTINUE
20    CONTINUE
      IF(K,NE,NT) GO TO 51
      RETURN
50    WRITE(NW,100)
      STOP
51    WRITE(NW,101)
      STOP
100  FORMAT(1H1,'ERROR EN LA SUBROUTINA COPY',/1H ,' NO COINCIDE EL NUMERJ
      *O DE ELEMENTOS DEL VECTOR TRANSFORMADO CON NT')
101  FORMAT(1H1,'ERROR EN COPY',/1H ,'EN LA TRANSFORMACION DE LOS ELEMENJ

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

*TOS DEL VECTOR EN LA MATRIZ,NO COINCIDE EL NUMERO DE ELEMENTOS CONJ
* NT')
END
C ELEMENT JNVS0106
SUBROUTINE OUTPUT(IND,A,NW)
C -----
C SUBROUTINA PARA ESCRIBIR LA MATRIZ A POR EL PERIFERICO DE PAPEL
C IMPRESO,
C
C CON ESTA SUBROUTINA ESCRIBIMOS LAS MATRICES EN BLOQUES DE 7 COLUM-
C NAS(OCUPAMOS 119 CARACTERAS DE ANCHO)
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION A(30,30)
J2=0
IVEC=0
IF(IND,LT,7)GO TO 20
N=IND/7
C ESCRIBIMOS EL NUMERO DE BLOQUE QUE ESTAMOS IMPRIMIENDO,
DO 10 I=1,N
IVEC=IVEC+1
WRITE(NW,101)IVEC
J1=J2+1
J2=J1+6
WRITE(NW,103)(JJ,JJ=J1,J2)
DO 15 K=1,IND
15 WRITE(NW,102)K,(A(K,J),J=J1,J2)
10 CONTINUE
IF(J2,EQ,IND)GO TO 30
IVEC=IVEC+1
WRITE(NW,101)IVEC
20 J1=J2+1
WRITE(NW,103)(JJ,JJ=J1,IND)
DO 40 K=1,IND
40 WRITE(NW,102)K,(A(K,J),J=J1,IND)
30 CONTINUE
RETURN
101 FORMAT(////1H ,40X,'B L O Q U E N U M E R O ',I2////)
102 FORMAT(1H ,I2,1X,7(D15,8,2X))
103 FORMAT(1H ,3X,7(7X,I2,8X)/1H ,3X,7(15(1H=),2X))
END
C ELEMENT JNVS0109
SUBROUTINE TRAZA(A,B,TR,N)
C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA TRAZA DE UNA MATRIZ C=A*B DONDE
C CADA MATRIZ DE LA MULTIPLICACION TIENE DIEMNSIONES (N,N)
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION A(30,30),B(30,30)
C
TR=0,DO
DO 1 I=1,N
DO 2 K=1,N
2 TR=TR+A(I,K)*B(K,I)
1 CONTINUE
RETURN
END
C ELEMENT JNVS1006
SUBROUTINE EIGEND(F,V,N,MD,RHO)
C ESTA SUBROUTINA DIAGONALIZA UNA MATRIZ REAL Y SIMETRICA DE ORDEN N,
C RHO ES EL MAYOR ELEMENTO NO-DIAGONAL RESULTANTE DESPUES DE LA
C DIAGONALIZACION
C F ES LA MATRIZ A DIAGONALIZAR

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C V ES LA MATRIZ DE VECTORES PROPIOS ORDENADOS EN COLUMNAS
C JACOBI OPERA SOLO CON EL TRIANGULO INFERIOR IZQUIERDO Y ASUME
C EL RESTO DE LOS ELEMENTOS.
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  COMMON NUMORB, NR, NW, NT
  DIMENSION F(30,30), V(30,30)
  DIMENSION FAUX(30)

C
C INICIALIZAMOS LA MATRIZ V A LA IDENTIDAD
C
  DO 21 I=1,N
  DO 22 J=1,N
  V(I,J)=0,DO
22 CONTINUE
  V(I,I)=1,DO
21 CONTINUE

C
C COMPROBAMOS SI SE HA LLEGADO A LA DIAGONALIZACION
C
  2 CONTINUE
  TE=0,0
  DO 31 I=2,N
  K=I-1
  DO 1 J=1,K
  1 TE=TE+2,*F(I,J)*F(I,J)
31 CONTINUE
  MA=0
  TE=DSQRT(TE)
  A=N
  TE=TE/A
  IF(TE,LT,RHO)TE=RHO

C
C DIAGONALIZAMOS
C
  3 CONTINUE
  DO 140 II=2,N
  IJ=II-1
  DO 14 JJ=1,IJ
  IF(DABS(F(II,JJ))-TE)14,4,4
  4 MA=1
  V1=F(JJ,JJ)
  V2=F(II,JJ)
  V3=F(II,II)
  U=.5*(F(JJ,JJ)-F(II,II))
  IF(DABS(U)-.000001)5,6,6
  5 OMEGA=-1,0
  GO TO 7
  6 OMEGA=-F(II,JJ)/DSQRT(F(II,JJ)*F(II,JJ)+U*U)
  Z=1,
  IF(U,LT,0,)Z=-Z
  OMEGA=OMEGA*Z
  7 SINT=OMEGA/DSQRT(2.*(1.+DSQRT(1.-OMEGA*OMEGA)))
  COST=DSQRT(1.-SINT*SINT)
  DO 13 I=1,N
  IF(I-II)9,8,8
  8 TEM=F(I,JJ)*COST-F(I,II)*SINT
  F(I,II)=F(I,JJ)*SINT+F(I,II)*COST
  F(I,JJ)=TEM
  GO TO 12
  9 IF(I-JJ)10,11,11
  10 TEM=F(JJ,I)*COST-F(II,I)*SINT
  F(II,I)=F(JJ,I)*SINT+F(II,I)*COST

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

      F(JJ,I)=TEM
      GO TO 12
11  TEM=F(I,JJ)*COST-F(II,I)*SINT
      F(II,I)=F(I,JJ)*SINT+F(II,I)*COST
      F(I,JJ)=TEM
12  TEM=V(I,JJ)*COST-V(I,II)*SINT
      V(I,II)=V(I,JJ)*SINT+V(I,II)*COST
13  V(I,JJ)=TEM
      F(JJ,JJ)=V1*COST*COST+V3*SINT*SINT-2.*V2*SINT*COST
      F(II,II)=V1*SINT*SINT+V3*COST*COST+2.*V2*SINT*COST
      F(II,JJ)=2.*U*SINT*COST+V2*(COST*COST-SINT*SINT)
14  CONTINUE
140 CONTINUE
      IF(MA=1)16,15,15
15  MA=0
      GO TO 3
16  IF(TE-RHO)17,17,2
17  CONTINUE
C
C  TERMINA EL PROCESO, SIMETRIZAMOS LA MATRIZ DE VALORES PROPIOS.
C
      DO 18 I=1,N
      DO 19 J=1,I
      IF(I,EQ,J)GO TO 20
      F(J,I)=F(I,J)
20  CONTINUE
19  CONTINUE
18  CONTINUE
C
C  ORDENAMOS LOS VALORES Y VECTORES PROPIOS
C
      DO 50 I=1,N
      DO 51 J=I,N
      IF(F(I,I)-F(J,J))60,60,61
C  1  CAMBIO DE ORDEN
61  CONTINUE
      VAUX=F(I,I)
      F(I,I)=F(J,J)
      F(J,J)=VAUX
      DO 70 K=1,N
      FAUX(K)=V(K,I)
      V(K,I)=V(K,J)
      V(K,J)=FAUX(K)
70  CONTINUE
C  2  SE MANTIENE EL ORDEN
60  CONTINUE
51  CONTINUE
50  CONTINUE
      RETURN
      END
C  ELEMENT JNVS1005
      SUBROUTINE UNPACK(IJ,KL,I,J,K,L)
C  SUBROUTINA PARA DESEMPAQUETAR LOS INDICES DE LAS INTEGRALES BIELEC-
C  TRONICAS
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      I=IJ/256
      J=IJ-I*256
      K=KL/256
      L=KL-K*256
      RETURN
      END
C  ELEMENT JNVS0707

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

SUBROUTINE INTEGR

```

C
C   CALCULO DE LAS INTEGRALES MONOELECTRONICAS Y BIELECTRONICAS.
C   APLICANDO O NO LAS PROPIEDADES DE SIMETRIA DE LA MOLECULA,
C   LOS DATOS DE ENTRADA SON:
C   **DATOS DE LOS ORBITALES
C   **ICON:SI VALE 0 SE USAN GAUSIANAS SIN CONTRAER,EN CASO CONTRA-
C   RIO SE USAN CONTRAIDAS.
C   *SI ICON=1 ENTONCES SE LEEN ADEMAS:
C     **LOS COEFICIENTES DE LA CONTRACCION EN EL ORDEN(S,PX,PY,PZ)
C     EL FORMATO 4D20,11
C   ** ISYM:SI VALE CERO NO SE USAN LAS PROPIEDADES DE SIMETRIA,SI
C     VALE 1 SI QUE SE USAN
C     EL FORMATO ES 11
C   *SI ISYM=1 ENTONCES SE LEEN ADEMAS:
C   ** NTRANS:NUMERO DE TRANSFORMACIONES DE SIMETRIA ENTRE LOS ORBI-
C     TALES DE LA BASE
C     EL FORMATO ES 12
C   ** MTRANS(I,J):MATRIZ DE LAS TRANSFORMACIONES DE SIMETRIA
C     ,MAXIMO DE 30 TRANSFORMACIONES
C     ,SOLO SE CONSIDERAN TRANSFORMACIONES ENTRE LA BASE
C     ,SE LEEN TANTAS FICHAS COMO ORBITALES DE BASE TENGAMOS
C     EL FORMATO ES 3012
C
C   ES NECESARIO CONOCER:
C   -----
C   DBORB;MATRIZ DE LOS DATOS DE LOS ORBITALES(COOR-
C     DENADAS Y EXPONENTE)
C   ITO RB;TIPO DE ORBITAL(S,PX,PY,PZ)
C   NNUCL;NUMERO ,EN EL ORDEN DE ENTRADA DE LOS DATOS
C     DE LOS NUCLEOS,DEL NUCLEO SOBRE EL QUE SE
C     ASIGNA EL ORBITAL(SOLO IMPORTANTE PARA EL
C     CASO DE MOVIMIENTOS DE LOS NUCLEOS)
C
C   COMO RESULTADO SE OBTIENE:
C   -----
C   H;MATRIZ DE LA PARTE MONOELECTRONICA DEL OPI, DE FOCK
C   INTEGRALES S,T,V Y BIELECTRONICAS
C
C*
C   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C   COMMON NUMORB,NR,NW,NT
C   COMMON/START/NNRNW
C   COMMON/A/IWAY(10)
C   COMMON/C1/DNUCL,IZ,NUMNUC
C   COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
C   COMMON/C11/DBORB,NNUCL(30),ITORB(30)
C   COMMON/C19/H(465)
C   COMMON/C20/IIJ(500),IKL(500),VALINT(500)
C   COMMON/C21/ETA
C   DIMENSION IOPT(3)
C   COMMON/C24/KK(500),LL(500)
C   DIMENSION ETA(30,9),VLIST(10,4)
C   DIMENSION DNUCL(10,3),DBORB(30,4),IZ(10)
C
C   LECTURA DE LOS DATOS DE LA BASE
C
C   NOTA:**NO SE LEEN SI SE TRATA DE UN BARRIDO O DE UNA OPTIMIZACION
C     IF(IWAY(3),NE,0)GO TO 9
C   CALL ININTG
C   9   CONTINUE
C     WRITE(NW,105)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C*
C   INTRODUCCION DE LOS DATOS DE LOS ORBITALES DENTRO DE LA MATRIZ ÉTA
C   SEGUN ESTE CONVENIO
C       ETA(I,1)=COORDENADA X
C       ETA(I,2)=COORDENADA Y
C       ETA(I,3)=COORDENADA Z
C       ETA(I,4)=EXPONENTE
C       ETA(I,5)=SE PONE UN UNO CUALQUIERA QUE SEA I
C       ETA(I,6)=COEFICIENTE DE LA PARTE S
C       ETA(I,7)=COEFICIENTE DE LA PARTE PX
C       ETA(I,8)=COEFICIENTE DE LA PARTE PY
C       ETA(I,9)=COEFICIENTE DE LA PARTE PZ
C   *** LA FUNCION GAUSIANA TIENE LA FORMA GENERAL DE:
C       GTO=(CS+CPX+CPY+CPZ)EXP(-ALFA**2)
C   SI NUESTRAS FUNCIONES DE BASE SON GAUSIANAS S,PX,PY O PZ PURAS,
C   LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES ANTES VISTOS SERAN CERO EN TODOS
C   CASOS MENOS EN EL COEFICIENTE DEL TIPO DE ORBITAL CONSIDERADO
C*
      DO 10 I=1,NUMORB
      DO 1 J=1,4
1     ETA(I,J)=DBORB(I,J)
10    CONTINUE
      DO 2 I=1,NUMORB
2     ETA(I,5)=1,0
C     LEEMOS ICON
      READ(NR,100)ICON
C
      IF(ICON=1)14,15,15
14    CONTINUE
      DO 4 I=1,NUMORB
      DO 3 J=6,9
3     ETA(I,J)=0,DO
C     ,,ORBITAL S
      IF(ITORB(I),EQ,0)ETA(I,6)=1,DO
C     ,,ORBITAL PX
      IF(ITORB(I),EQ,1)ETA(I,7)=1,DO
C     ,,ORBITAL PY
      IF(ITORB(I),EQ,2)ETA(I,8)=1,DO
C     ,,ORBITAL Pz
      IF(ITORB(I),EQ,3)ETA(I,9)=1,DO
4     CONTINUE
      GO TO 16
15    CONTINUE
      READ(NR,104)(ETA(I,J),J=6,9)
16    CONTINUE
C
C   INTRODUCIMOS LOS DATOS DE LOS NUCLEOS DENTRO DE VLIST SEGUN EL
C   CONVENIO:
C       VLIST(I,1)=COORDENADA X
C       VLIST(I,2)=COORDENADA Y
C       VLIST(I,3)=COORDENADA Z
C       VLIST(I,4)=NUMERO ATOMICO DEL NUCLEO EN CUESTION:
      DO 50 I=1,NUMNUC
      DO 5 J=1,3
5     VLIST(I,J)=DNUCL(I,J)
50    CONTINUE
      DO 6 I=1,NUMNUC
6     VLIST(I,4)=IZ(I)
C*
C   LEEMOS LAS CLAVES PARA DECIDIR SI SE ESCRIBEN LAS INTEGRALES
C   MONOELECTRONICAS Y LAS BIELECTRONICAS
C       ** SI IOPT(1)=0 NO SE ESCRIBEN LAS INTEGRALES DE SOLAPA-

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C          MIENTO
C          ** SI IOPT(2)=0 NO SE ESCRIBEN LAS INTEGRALES DE ENERGIA.
C          CINETICA NI LAS DE ATRACCION NUCLEAR
C          ** SI IOPT(3)=0 NO SE ESCRIBEN LAS INTEGRALES BIELECTRONICAS
DO 8 I0=1,3
8 IOPT(I0)=0
  IF(IWAY(3),NE,0)GO TO 11
  READ(NR,100)IOPT(1),IOPT(2),IOPT(3)
  WRITE(NW,101)IOPT(1),IOPT(2),IOPT(3)
11 CONTINUE
C*
C          NORMALIZACION DE LAS FUNCIONES GAUSIANAS DE BASE
CALL NORMLS(NUMORB)
C          ESCRIBIMOS LOS DATOS DE LOS ORBITALES GUARDADOS EN LA MATRIZ ETA
  IF(IWAY(3),NE,0)GO TO 12
  WRITE(NW,102)
  DO 7 I=1,NUMORB
7 WRITE(NW,103)(ETA(I,J),J=1,9)
12 CONTINUE
C          INICIALIZAMOS EL INDICADOR DE LA SIMETRIA
  ISYM=0
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C          LEEMOS UNA VARIABLE QUE NOS INDICA SI VAMOS A USAR PROPIEDADES DE
C          SIMETRIA EN EL CALCULO DE LAS INTEGRALES O NO, LA VARIABLE ES ISYM
C          *SI ISYM=0-->NO SE USAN PROPIEDADES DE SIMETRIA
C          *SI ISYM=1-->SI SE USAN PROPIEDADES DE SIMETRIA
  IF(IWAY(3),NE,0)GO TO 13
  READ(NR,100)ISYM
C
13 CONTINUE
C          SEGUN CUAL SEA EL VALOR DE ISYM,CALCULAMOS LAS INTEGRALES DE UNA U
C          OTRA FORMA
  IF(ISYM=1)20,21,21
C          NO USAMOS LA SIMETRIA
20 WRITE(NW,106)
  CALL NOSYM(IOPT,VLIST,NUMNUC)
  GO TO 30
C          USAMOS LA SIMETRIA
21 WRITE(NW,107)
  CALL SYM(IOPT,VLIST,NUMNUC)
30 CONTINUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C*
C          RETURN
100 FORMAT(3I1)
101 FORMAT(1H,'LOS VALORES DE LOS CODIGOS DE ESCRITURA DE LAS INTEGRA
  *LES ES'/1H,5X,IOPT(1)=',I1/1H,5X,IOPT(2)=',I1/1H,5X,IOPT(3)=
  *,I1/////
102 FORMAT(1H,'*DATOS DE LOS ORBITALES (MATRIZ ETA)*'//1H,7X,'X',
  *16X,'Y',16X,'Z',11X,'EXPONENTE',5X,'CONSTANTE NORML',5X,'CS',7X,
  *'CX',7X,'CY',7X,'CZ'//1H,130(1H-)//)
103 FORMAT(1H,5(D15,8,2X),4(D9,2,1X))
104 FORMAT(4D20,11)
105 FORMAT(1H1,40X,'EVALUACION DE LAS INTEGR
  *ALES'/1H,40X,55(1H*)/1H,40X,55(1H*)/////
106 FORMAT(/////1H,'*COMIENZA EL CALCULO'/1H,'NO SE USAN LAS PROPIED
  *DADES DE SIMETRIA'//)
107 FORMAT(/////1H,'*COMIENZA EL CALCULO'/1H,'SE USAN LAS PROPIEDAD
  *DES DE SIMETRIA'//)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

END
C ELEMENT JNVS0706
SUBROUTINE ININTG
C DEFINIMOS LA BASE PROBLEMA A ESTUDIAR
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/A/IWAY(10)
COMMON/C1/DNUCL,IZ,NUMNUC
COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
COMMON/C11/DBORB,NNUCL(30),ITORB(30)
COMMON/C20/I1J(500),IKL(500),VALINT(500)
DIMENSION INUCL(30)
DIMENSION DNUCL(10,3),DBORB(30,4),IZ(10)
DIMENSION CLASS(10)
DATA INUCL/' H','HE','LI','BE',' B',' C',' N',' O',' F','NE','NA'
*,'MG','AL','SI',' P',' S','CL','AR',' K','CA','SC','TI',' V','CR'
*,'MN','FE','CO','NI','CU','ZN'/
DATA CLASS/' S',' PX',' PY',' PZ',' DXX',' DYY',' DZZ',' DXY'
*,' DXZ',' DYZ'/
C .....
C LECTURA DE LOS DATOS
C .....
C LECTURA DE LOS DATOS DE LOS ORBITALES GAUSSIANOS
DO 1 I=1,NUMORB
1 READ(NR,90)NNUCL(I),ITORB(I),(DBORB(I,J),J=1,4)
C .....
C ESCRITURA DE LOS DATOS
C .....
WRITE(NW,20)
DO 6 I=1,NUMORB
III=NNUCL(I)
II=IZ(III)
IC=ITORB(I)
IC=IC+1
WRITE(27,102)NNUCL(I),ITORB(I),(DBORB(I,J),J=1,4)
6 WRITE(NW,101)NNUCL(I),INUCL(II),CLASS(IC),(DBORB(I,J),J=1,4)
C .....
C COMPROBACION DE LOS DATOS
C .....
DO 10 I=1,NUMORB
IF((ITT,LT,0).OR.(ITT,GT,10))GO TO 11
IF(ITT,GT,3)GO TO 12
10 CONTINUE
C
RETURN
11 WRITE(NW,30)
STOP
12 WRITE(NW,40)
STOP
20 FORMAT(1H,'DATOS DE LOS ORBITALES',/1H,5X,'NUCLEO',5X,'TIPO',9X
*,'COORDENADA X',10X,'COORDENADA Y',10X,'COORDENADA Z',10X,'EXPONENT'
*,'E',/1H,5X,6(1H*),5X,4(1H*),4X,4(20(1H*),2X))
30 FORMAT(1H1,'ERROR EN LA ENTRADA DE DATOS ,UN ORBITAL NO VALIDO'
*,'COMO TIPO')
40 FORMAT(1H1,'ERROR EN LA ENTRADA DE DATOS DE LOS ORBITALES,NO SE
*,'PUEDEN CALCULAR DE MOMENTO LAS INTEGRALES CON D')
90 FORMAT(12,1X,12,3(D15,8),D20,11)
101 FORMAT(5X,12,'=',A2,7X,A4,4X,4(D15,8,7X))
102 FORMAT(13,12,4(D15,8))
END
C ELEMENT JNVS0715

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

SUBROUTINE SYM(IOPT,VLIST,NOC)

```

C*
C   SUBROUTINA PARA CALCULAR LOS INDICES DE LAS INTEGRALES DISTINTAS
C   SEGUN LAS PROPIEDADES DE SIMETRIA,
C
C   LOS INDICES LOS AGRUPAMOS EN GRUPOS DE INDICES EQUIVALENTES, DE
C   FORMA QUE UNICAMENTE SE CALCULA LA PRIMERA INTEGRAL DE CADA GRUPO
C   DE INDICES,
C
C   LAS PROPIEDADES DE TRANSFORMACION FRENTE A LA SIMETRIA DE CADA
C   UNA DE LAS FUNCIONES DE BASE, SE INDICAN MEDIANTE LA MATRIZ DE
C   TRANSFORMACION MTRANS, EN LA QUE INDICAMOS EN QUE FUNCION SE TRANS-
C   FORMA LA FUNCION I, SE HA SEGUIDO EL CONVENIO DE QUE LAS FILAS
C   SON LAS FUNCIONES DE BASE Y QUE LAS COLUMNAS SON LAS OPERACIONES
C   DE SIMETRIA, DE FORMA QUE EL ELEMENTO MTRANS(3,5) INDICA EN QUE
C   FUNCION SE HA TRANSFORMADO LA QUE TIENE NUMERO 3 MEDIANTE LA
C   PROPIEDAD 5,
C
C   RESTRICCIÓN: UNICAMENTE SE HAN CONSIDERADO AQUELLOS TIPOS DE SIME-
C   TRIA QUE TRANSFORMAN UNA FUNCION EN OTRA; NO SE CONSIDERAN AQUELLOS
C   QUE TRANSFORMAN UNA FUNCION EN UNA COMBINACION LINEAL DE LA BASE,
C
C   LA ENTRADA DE DATOS ES DE ESTA FORMA:
C   -NTRANS=NUMERO DE TRANSFORMACIONES DE SIMETRIA QUE USAMOS, HA DE
C   SER MENOR O IGUAL A 30.
C   FORMATO 12
C   -MTRANS=MATRIZ DE TRANSFORMACION DE TODA LA BASE ATOMICA CON
C   LAS PROPIEDADES DE SIMETRIA CONSIDERADAS
C   NOTA: NO HACE FALTA INTRODUCIR LA TRANSFORMACION IDENTIDAD
C   FORMATO 3012
C
C   -----
C   -----
C   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C   COMMON NUMORB,NR,NW,NT
C   COMMON/C9/MTRANS
C   COMMON/C19/H(465)
C   COMMON/C20/II(500),JJ(500),VALINT(500)
C   DIMENSION MTRANS(30,30)
C   DIMENSION IOPT(3),VLIST(10,4)
C   DATA GUION/'-----'/
C*
C   LEEMOS EL NUMERO DE TRANSFORMACIONES DE SIMETRIA QUE VAMOS A
C   CONSIDERAR,
C
C   READ(NR,100)NTRANS
C*
C   LEEMOS LA MATRIZ DE TRANSFORMACION(MTRANS)
C
C   DO 1 I=1,NUMORB
C   1 READ(NR,100)(MTRANS(I,J),J=1,NTRANS)
C*   ESCRIBIMOS LA MATRIZ DE TRANSFORMACION
C   WRITE(NW,101)NTRANS
C   WRITE(NW,103)(I,I=1,NTRANS)
C   WRITE(NW,104)(GUION,I=1,NTRANS)
C   DO 2 I=1,NUMORB
C   2 WRITE(NW,102)(MTRANS(I,J),J=1,NTRANS)
C
C   CALCULO DE LAS INTEGRALES MONOELECTRONICAS
C
C   CALL STVIND(NTRANS,IOPT,NOC,VLIST)
C
C   CALCULO DE LAS INTEGRALES BIELECTRONICAS

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C
  CALL BIEIND(NTRANS,IOPT)
  RETURN
100 FORMAT(30I2)
101 FORMAT(////1H ,65(1H*)/1H , 'MATRIZ DE TRANSFORMACION DE LAS FUNCIO
  *NES DE BASE CON LA SIMETRIA'/1H , '*** M I T R A N S ***'//1H , 'USAMOS
  *',I3,' TRANSFORMACIONES'/1H ,65(1H*)/)
102 FORMAT(1H ,30I4)
103 FORMAT(1H ,30I4)
104 FORMAT(1H ,30A4)
  END
C
  ELEMENT JNVS0714
  SUBROUTINE STVIND(NTRANS,IOPT,NOC,VLIST)
C
C   CALCULO EFECTIVO DE LOS INDICES DE LAS INTEGRALES MONOELECTRONICAS
C
C   LA ESTRUCTURA ESTA PENSADA PARA UN MAXIMO DE 500 INTEGRALES
C   AL TERMINAR LOS CALCULOS LAS INTEGRALES ESTAN EN SU ORDEN CANONICO
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  COMMON NUMORB,NR,NW,NT
  COMMON/C9/MTRANS(30,30)
  COMMON/C19/H(465)
  COMMON/C20/II(500),JJ(500),VALINT(500)
  DIMENSION ISAVE(30),JSAVE(30),ISIGN(30),ISP(30)
  DIMENSION VALING(500),VALINV(500)
  DIMENSION IOPT(3),VLIST(5,4)
C
C   INICIALIZAMOS A CERO LAS INTEGRALES DE SOLAPAMIENTO, ENERGIA CINETICA
C   Y ATRACCION POR LOS NUCLEOS
  DO 7 I=1,500
    VALING(I)=0,D0
    VALINT(I)=0,D0
    VALINV(I)=0,D0
  7 CONTINUE
C*
C   CALCULO DE LAS INTEGRALES MONOELECTRONICAS DISTINTAS POR SIMETRIA
C   EQUIVALE A ESTUDIAR TODOS LOS INDICES DE LAS INTEGRALES H(I,J)
C   CON I>=J
C
  K=0
  L=0
  NINTS=0
  DO 1 I=1,NUMORB
  DO 10 J=1,I
C
  NCOUNT=1
  IJ=I*(I-1)/2+J
  IPR=I*J
C
  ISAVE(1)=I
  JSAVE(1)=J
  ISIGN(1)=1
  ISP(1)=IJ
C
C   CALCULAMOS TODOS LOS INDICES EQUIVALENTES A LA PAREJA ANTERIOR POR
C   LA MATRIZ MTRANS.
  DO 2 M=1,NTRANS
    IT=MTRANS(I,M)
    JT=MTRANS(J,M)
    ITPR=IT*JT
    IF((IT,EQ,0).OR.(JT,EQ,0))GO TO 20
    ITAG=1
    IF(ITPR,LT,0)ITAG=-1
C
C   ORDENAMOS LOS INDICES PARA SOLO TENER EN CUENTA EL TRIANGULO INFE-

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C   RIOR DE LA MATRIZ H(I,J)
      IT=IABS(IT)
      JT=IABS(JT)
      IF(IT,GE,JT)GO TO 3
      ID=IT
      IT=JT
      JT=ID
      3 IJT=IT*(IT-1)/2+JT
C   COMPROBACION DE SI YA SE HA TENIDO EN CUENTA ESTE GRUPO DE INDICES
      IF(IJ-IJT)4,5,15
C   COMPROBACION DE SI ES CERO LA INTEGRAL H(I,J)
      5 ICOMP=IPR+ITPR
      IF(ICOMP)2,15,2
C   DESCARTAMOS LAS REPETICIONES
      4 CONTINUE
      DO 6 KC=1,NCOUNT
      IF(ISP(KC),EQ,IJT)GO TO 2
      6 CONTINUE
      NCOUNT=NCOUNT+1
      ISP(NCOUNT)=IJT
      ISAVE(NCOUNT)=IT
      JSAVE(NCOUNT)=JT
      ISIGN(NCOUNT)=ITAG
      2 CONTINUE
C   CALCULO DE LAS INTEGRALES DISTINTAS POR SIMETRIA
      RINTG=GSGINT(I,J)
      RINTT=GSTINT(I,J)
      RINTV=GSVINT(I,J,VLIST,NOC)
      DO 16 N=1,NCOUNT
      INDI=ISP(NCOUNT)
      I2=ISAVE(INDI)
      J2=JSAVE(INDI)
      II(INDI)=I2
      JJ(INDI)=J2
C   CALL PACK(I2,J2,K,L,I2J2,KL)
C   I1J(INDI)=I2J2
C   IKL(INDI)=0
      PARAM=ISIGN(NCOUNT)
      VALING(INDI)=RINTG*PARAM
      VALINT(INDI)=RINTT*PARAM
      VALINV(INDI)=RINTV*PARAM
      16 CONTINUE
C
      NINTS=NINTS+NCOUNT
      15 CONTINUE
      10 CONTINUE
      1 CONTINUE
C*
C   ESCRIBIMOS LAS INTEGRALES SOBRE LOS PERIFERICOS Y SEGUN EL VALOR
C   DE IOPT(1), SOBRE EL LISTADO
C
      WRITE(NW,103)NINTS
      NIN=NINTS
C   ESCRIBIMOS LAS INTEGRALES DE SOLAPAMIENTO
C   -----
      NOTAPE=20
C   -----
      WRITE(NW,105)
      WRITE(NOTAPE,100)NINTS
      WRITE(27,100)NINTS
      IOPTG=IOPT(1)
      CALL INTWRT(NOTAPE,NIN,IOPTG)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

      ENDFILE NOTAPE
      REWIND NOTAPE
C     ESCRIBIMOS LAS INTEGRALES DE ENERGIA CINETICA.
C     -----
      NOTAPE=8
C     -----
      WRITE(NW,106)
      WRITE(NOTAPE,100)NINTS
      IOPTT=IOPT(2)
      CALL INTWRT(NOTAPE,NIN,IOPTT)
      ENDFILE NOTAPE
      REWIND NOTAPE
C     ESCRIBIMOS LAS INTEGRALES DE ATRACCION POR LOS NUCLEOS
C     -----
      NOTAPE=25
C     -----
      WRITE(NW,107)
      WRITE(NOTAPE,100)NINTS
      IOPTV=IOPT(2)
      CALL INTWRT(NOTAPE,NIN,IOPTV)
      ENDFILE NOTAPE
      REWIND NOTAPE
C     CALCULAMOS EL SUPERVECTOR H Y LO ESCRIBIMOS
      DO 17 I=1,NINTS
      VALINT(I)=VALINT(I)+VALINV(I)
17    H(I)=VALINT(I)
      NOTAPE=21
      WRITE(NW,100)NINTS
18    WRITE(NOTAPE,101)(VALINT(I),I=1,NT)
      ENDFILE NOTAPE
      REWIND NOTAPE
      RETURN
20    CONTINUE
      WRITE(NW,104)
      STOP
100   FORMAT(I10)
101   FORMAT(2(250D15,8))
103   FORMAT(1H , 'NUMERO DE INTEGRALES MONOELECTRONICAS DISTINTAS POR
      *SIMETRIA =',I10)
104   FORMAT(1H1, 'ERROR EN LA MATRIZ MTRANS, UNO DE LOS ELEMENTOS ES CERO
      *')
105   FORMAT(/1H ,5X, 'INTEGRALES DE SOLAPAMIENTO'////)
106   FORMAT(/1H ,5X, 'INTEGRALES DE ENERGIA CINETICA'////)
107   FORMAT(/1H ,5X, 'INTEGRALES DE ATRACCION POR LOS NUCLEOS'////)
      END
C     ELEMENT JNVS0701
      SUBROUTINE BIEIND(NTRANS,IOPT)
C*
C     CALCULO EFECTIVO DE LOS GRUPO DE INDICES EQUIVALENTES
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON NUMORB,NR,NW,NT
      COMMON/C9/MTRANS(30,30)
      COMMON/C20/II(500),JJ(500),VALINT(500)
      COMMON/C24/KK(500),LL(500)
      DIMENSION ISAVE(30),JSAVE(30),KSAVE(30),LSAVE(30),ISIGN(30)
      DIMENSION AISPI(30)
      DIMENSION IOPT(3)
      DATA ZERO,NN/0,DO,500/
9     CONTINUE
      WRITE(NW,1000)
      IF(IOPT(3),NE,1)GO TO 9

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C*
C  INVESTIGAMOS TODOS LOS INDICES DISTINTOS
   RNINTS=0,
   NJN=0
C  DEJAMOS UN ESPACIO EN BLANCO EN EL PERIFERICO PARA ESCRIBIR LUEGO
C  EL NUMERO TOTAL DE INTEGRALES BIELECTRONICAS(RNINTS)
C  -----
   NOTAPE=9
C  -----
   WRITE(NOTAPE)RNINTS
   DO 1 I=1,NUMORB
   DO 10 J=1,J
   DO 15 K=1,I
       LMAX=K
       IF(I,EQ,K)LMAX=J
   DO 20 L=1,LMAX
C
   NCOUNT=1
   P=P4(I,J,K,L)
C
   ISAVE(1)=I
   JSAVE(1)=J
   KSAVE(1)=K
   LSAVE(1)=L
   AISP(1)=P
   ISIGN(1)=1
   PROD=FLOAT(I*J)*FLOAT(K*L)
C  CALCULAMOS LAS INTEGRALES EQUIVALENTES POR SIMETRIA
   DO 2 M=1,NTRANS
       IT=MTRANS(I,M)
       JT=MTRANS(J,M)
       KT=MTRANS(K,M)
       LT=MTRANS(L,M)
       TPROD=FLOAT(IT*JT)*FLOAT(KT*LT)
       ITAG=1
       IF(TPROD,LT,ZERO)ITAG=-1
C  ORDENAMOS LOS INDICES PARA QUE TODOS ESTEN EN EL TRIANGULO INFE-
C  RIOR DE LA MATRIZ H(I,J,K,L)
   CALL ORDER4(IT,JT,KT,LT)
   PT=P4(IT,JT,KT,LT)
C  COMPROBACION DE SI LA INTEGRAL HA SIDO CONSIDERADA ANTES
   IF(P=PT)3,4,25
C  COMPROBACION DE SI ES CERO
4   ICOMP=PROD+TPROD
   IF(ICOMP)2,25,2
C  DESCARTAMOS LAS REPETICIONES
3   CONTINUE
   DO 5 KC=1,NCOUNT
       IF(AISP(KC).EQ,PT)GO TO 2
5   CONTINUE
   NCOUNT=NCOUNT+1
C
   AISP(NCOUNT)=PT
   ISAVE(NCOUNT)=IT
   JSAVE(NCOUNT)=JT
   KSAVE(NCOUNT)=KT
   LSAVE(NCOUNT)=LT
   ISIGN(NCOUNT)=ITAG
2   CONTINUE
C  CALCULO DE LAS INTEGRALES DISTINTAS POR SIMETRIA
   DO 16 N=1,NCOUNT
       NJN=NJN+1

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

RINTM=GSMINT(I,J,K,L)
INDI=AISP(NCOUNT)
I2=ISAVE(INDI)
J2=JSAVE(INDI)
K2=KSAVE(INDI)
L2=LSAVE(INDI)
C CALL PACK(I2,J2,K2,L2,I2J2,K2L2)
C I1J(INDI)=I2J2
C IKL(INDI)=K2L2
  II(INDI)=I2
  JJ(INDI)=J2
  KK(INDI)=K2
  LL(INDI)=L2
PARAM=ISIGN(NCOUNT)
VALINT(INDI)=RINTM*PARAM
IF(NIN,NE,500)GO TO 17
CALL INTWR2(NOTAPE,IOPTM,NIN)
NIN=0
17 CONTINUE
16 CONTINUE
C
RNINTS=RNINTS+NCOUNT
25 CONTINUE
20 CONTINUE
15 CONTINUE
10 CONTINUE
  1 CONTINUE
WRITE(NW,103)RNINTS
CALL INTWR2(NOTAPE,IOPTM,NIN,INDK,INDL)
ENDFILE NOTAPE
REWIND NOTAPE
WRITE(NOTAPE)RNINTS
REWIND NOTAPE
RETURN
100 FORMAT(2(250D15,8))
103 FORMAT(1H,'NUMERO DE INTEGRALES BIELECTRONICAS DISTINTAS POR
  *SIMETRIA =',D15,8)
104 FORMAT(///1H,'INDICES DE LAS INTEGRALES BIELECTRONICAS'//)
1000 FORMAT(5(1H,' I J K L',1X,8X,'VALOR',7X,'*'))
END
C ELEMENT JNVS0712
SUBROUTINE ORDER4(I,J,K,L)
C
C ORDENACION DE LOS INDICES I,J,K,L DE FORMA QUE
C I>=J
C K>=L
C IJ>=KL
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
I=IABS(I)
J=IABS(J)
K=IABS(K)
L=IABS(L)
IF(I=J)1,2,2
1 M=I
  I=J
  J=M
2 IF(K=L)3,4,4
3 M=K
  K=L
  L=M
4 IF(I=K)6,5,7

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

5 IF(J-L)6,7,7
6 M=J
  I=K
  K=M
  M=J
  J=L
  L=M
7 RETURN
END
C ELEMENT JNVS0810
SUBROUTINE INTWRT(NDTAP, NIN, IOPTX)
IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
COMMON NUMORB, NR, NW, NT
COMMON/C20/II(500), JJ(500), VALINT(500)
IF(IOPTX, NE, 1)GO TO 6
WRITE(NW, 108)
WRITE(NW, 100)((II(M), JJ(M), VALINT(M)), M=1, NIN)
6 CONTINUE
C ESCRITURA SOBRE EL PERIFERICO
WRITE(NDTAP, 101)(VALINT(M), M=1, NIN)
  WRITE(27, 101)(VALINT(M), M=1, NIN)
RETURN
100 FORMAT(5(1X, I2, 1X, I2, 2X, D15, 8, ' *'))
101 FORMAT(15D15, 8)
108 FORMAT(5(1H, ' I ', 1X, ' J ', 2X, ' INTEGRAL *'))
END
C ELEMENT JNVS0705
SUBROUTINE HFORM
C CALCULO DE LA MATRIZ H COMO SUPERVECTOR
C
  IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
  COMMON NUMORB, NR, NW, NT
  COMMON/C19/H(465)
  DIMENSION V(465)
C LEEMOS T(EN H)
  READ(8, 100)NINTST
  READ(8, 101)(H(I), I=1, NINTST)
  REWIND 8
C LEEMOS V
  READ(25, 100)NINTSV
  IF(NINTST, NE, NINTSV)GO TO 10
  READ(25, 101)(V(I), I=1, NINTSV)
  REWIND 25
C CALCULAMOS Y ESCRIBIMOS H
  DO 1 I=1, NINTST
1 H(I)=H(I)+V(I)
  WRITE(21, 101)(H(I), I=1, NINTST)
  ENDFILE 21
  REWIND 21
  WRITE(NW, 103)NINTSV
  WRITE(27, 101)(H(I), I=1, NINTST)
  RETURN
10 WRITE(NW, 102)
  STOP
100 FORMAT(I10)
101 FORMAT(15D15, 8)
102 FORMAT(1H1, 'EROR EN HFORM, NO COINCIDEN EN NUMERO LAS INTEGRALES
  * T Y V, STOP')
103 FORMAT(I10)
END
C ELEMENT JNVS0710

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

SUBROUTINE NOSYM(IOPT,VLIST,NUMNUC)
C
C SUBROUTINA PARA EL CALCULO DE LAS INTEGRALES SIN HACER USO DE LAS
C PROPIEDADES DE SIMETRIA DE LA MOLECULA.
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/A/IWAY(10)
COMMON/C19/H(465)
COMMON/C20/II(500),JJ(500),VALINT(500)
COMMON/C24/KK(500),LL(500)
DIMENSION IOPT(3),VLIST(10,4)
WRITE(NW,104)
104 FORMAT(1H,'CALCULAMOS: '/1H,'11(1H*)/')
C *** PRIMERO LOS DE LAS INTEGRALES MONOELECTRONICAS
C*
C CALCULO DE LAS INTEGRALES DE SOLAPAMIENTO
C -----
C NOTAPE=20
C -----
C CALL GINTS(NOTAPE,IOPT)
C*
C CALCULO DE LAS INTEGRALES DE ENERGIA CINETICA
C -----
C NOTAPE=8
C -----
C CALL TINTS(NOTAPE,IOPT)
C*
C CALCULO DE LAS INTEGRALES DE REPULSION POR EL NUCLEO
C -----
C NOTAPE=25
C -----
C CALL VINTS(NOTAPE,VLIST,NUMNUC,IOPT)
C CALCULO DEL SUPERVECTOR H Y ESCRITURA SOBRE EL PERIFERICO 21
CALL HFORMI
C ***LUEGO LAS INTEGRALES BIELECTRONICAS
C*
C CALCULO DE LAS INTEGRALES DE REPULSION INTERELECTRONICA
C -----
C NOTAPE=9
C -----
C CALL MINTS(NOTAPE,IOPT)
RETURN
END
C ELEMENT JNVS0905
FUNCTION P4(I,J,K,L)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
P2IJ=J+(I*I-I)/2
P2KL=L+(K*K-K)/2
P4=P2KL+(P2IJ*P2IJ-P2IJ)/2
RETURN
END
C ELEMENT JNVS0716
SUBROUTINE TINTS(NOTAPE,IOPT)
C*
C CALCULO DE LAS INTEGRALES DE ENERGIA CINETICA
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/C20/INDI(500),INDJ(500),VALINT(500)
COMMON/C21/ETA
COMMON/C23/NINTS,NINTS2

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```
DIMENSION IOPT(3)
DIMENSION ETA(30,9)
WRITE(NW,109)
NINTS=(NUMORB*NUMORB+NUMORB)/2
C
WRITE(NOTAPE,100)NINTS
WRITE(NW,101)NINTS
C*
C
ESCRITURA DE LAS INTEGRALES SI ASI SE HA INDICADO EN EL PARAMETRO
C
IOPT(2) (VALOR DE IPT(2)=1)
IOPTV=IOPT(2)
C*
NIN=0
ITAG=0
K=0
L=0
DO 50 I=1,NUMORB
DO 52 J=1,I
NIN=NIN+1
INDI(NIN)=I
INDJ(NIN)=J
VALINT(NIN)=GSTINT(I,J)
IF(NIN,NE,500)GO TO 51
CALL INTWRT(NOTAPE,NIN,IOPTV)
NIN=0
51 CONTINUE
52 CONTINUE
50 CONTINUE
CALL INTWRT(NOTAPE,NIN,IOPTV)
ENDFILE NOTAPE
REWIND NOTAPE
RETURN
100 FORMAT(I10)
101 FORMAT(1H ,20X,'SE CALCULAN ',I8,' INTEGRALES DE E. CINETICA'////)
102 FORMAT(1H1,'* ERROR EN LA LECTURA DE LOS INDICES EN EL PERIFERICO
*NUMERO: 24,/TINTS/')
```

```
109 FORMAT(1H ,20X,'INTEGRALES DE ENERGIA CINETICA,/')
END
C
ELEMENT JNVS0717
SUBROUTINE VINTS(NOTAPE,VLIST,NOC,IOPT)
C
C
CALCULO DE LAS INTEGRALES DE ATRACCION POR LOS NUCLEOS
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/C20/INDI(500),INDJ(500),VALINT(500)
COMMON/C21/ETA
COMMON/C23/NINTS,NINTS2
DIMENSION IOPT(3)
DIMENSION ETA(30,9)
DIMENSION VLIST(10,4)
WRITE(NW,109)
NCOUNT=0
NINTS=(NUMORB*NUMORB+NUMORB)/2
WRITE(NOTAPE,100)NINTS
WRITE(NW,101)NINTS
IOPTT=IOPT(2)
C*
NIN=0
ITAG=0
K=0
L=0
```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```
DO 50 I=1,NUMORB
DO 52 J=1,I
NIN=NIN+1
INDI(NIN)=I
INDJ(NIN)=J
VALINT(NIN)=GSVINT(I,J,VLIST,NOC)
IF(NIN,NE,500)GO TO 51
CALL INTWRT(NOTAPE,NIN,IOPIT)
NIN=0
```

```
51 CONTINUE
52 CONTINUE
50 CONTINUE
```

```
CALL INTWRT(NOTAPE,NIN,IOPIT)
ENDFILE NOTAPE
REWIND NOTAPE
RETURN
```

```
100 FORMAT(I10)
101 FORMAT(1H ,20X,,SE CALCULAN , ,18,, INTEGRALES DE E. POTENCIAL,////)
*/)
102 FORMAT(1H1, '* ERROR EN LA LECTURA DE LOS INDICES EN EL PERIFERICO
*NUMERO 24,/VINTS/')
109 FORMAT(1H ,20X,'INTEGRALES DE ENERGIA POTENCIAL' /)
```

```
END
ELEMENT JNVS0904
SUBROUTINE INTWR2(NOTAPE,IOPTM,NIN)
SUBROUTINA PARA ESCRIBIR LAS INTEGRALES BIELECTRONICAS SOBRE
EL PERIFERICO NOTAPE Y SOBRE EL LISTADO INDICADO POR NW
```

```
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/C20/II(500),JJ(500),VALINT(500)
COMMON/C24/KK(500),LL(500)
```

```
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C COMIENZA EL PROCESO DE ESCRITURA
C SI IOPTM=0-->NO SE ESCRIBE SOBRE EL LISTADO
C SI IOPTM=OTRO NUMERO-->SE ESCRIBE SOBRE EL LISTADO
C*
C EN TODOS CASOS SE ESCRIBEN LAS INTEGRALES Y LOS INDICES SOBRE
C LA CINTA NOTAPE
```

```
C LA ESTRUCTURA DE LA CINTA ES (INDICE-INTEGRAL)
C LOS INDICES SE HAYAN EMPAQUETADOS
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
IF(IOPTM,E0,0)GO TO 6
WRITE(NW,100)((II(M),JJ(M),KK(M),LL(M),VALINT(M)),M=1,NIN)
```

```
6 CONTINUE
ESCRIBIMOS SOBRE LA UNIDAD PERIFERICA NOTAPE LAS INTEGRALES
WRITE(27,101)((II(M),JJ(M),KK(M),LL(M),VALINT(M)),M=1,NIN)
WRITE(NOTAPE,101)((II(M),JJ(M),KK(M),LL(M),VALINT(M)),M=1,NIN)
RETURN
```

```
100 FORMAT(4(1H ,4(I3),1X,D15,8,2X))
101 FORMAT( 6(I3,I3,I3,I3,D15,8))
```

```
END
ELEMENT JNVS0708
SUBROUTINE MINTS(NOTAPE,IOPIT)
CALCULO DE LAS INTEGRALES DE REPULSION INTERELECTRONICA
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

COMMON/A/IWAY(10)
COMMON/C20/II(500),JJ(500),VALINT(500)
COMMON/C21/ETA
COMMON/C24/KK(500),LL(500)
DIMENSION IOPT(3)
DIMENSION ETA(30,9)
WRITE(NW,109)
IF(IWAY(10),NE,1)GO TO 11
  READ(1)I,J,K,L,INMAX
REWIND 1
NIN=0
GO TO 10
11 CONTINUE
RNINTS=(NUMORB*NUMORB+NUMORB)/2
RNINTS=(RNINTS*RNINTS+RNINTS)/2
WRITE(NOTAPE,1001)RNINTS
  WRITE(27,1001)RNINTS
WRITE(NW,111)RNINTS
C  ESCRITURA DE LAS INTEGRALES SI ASI SE HA INDICADO EN EL PARAMETRO
C  IOPT(3) (VALOR DE IPT(3)=1)
  IOPTM=IOPT(3)
  IF(IOPT(3),EQ,0)GO TO 9
  WRITE(NW,1000)
9 CONTINUE
C*
C  *** AHORA CALCULAMOS LOS INDICES DE LAS BIELECTRONICAS.
C*
  NIN=0
  DO 100 J=1,NUMORB
  DO 105 J=1,I
  DO 110 K=1,I
  INMAX=K
  IF(K,EQ,I)INMAX=J
  DO 115 L=1,INMAX
10 CONTINUE
  NIN=NIN+1
C  CALL PACK(I,J,K,L,IJ,KL)
C  IJ(NIN)=IJ
C  IKL(NIN)=KL
  II(NIN)=I
  JJ(NIN)=J
  KK(NIN)=K
  LL(NIN)=L
  VALINT(NIN)=GSMINT(I,J,K,L)
  IF(NIN,NE,500)GO TO 101
C*
C  GUARDAMOS LAS INTEGRALES EN EL PERIFERICO NOTAPE
  CALL INTWR2(NOTAPE,IOPTM,NIN)
  NIN=0
101 CONTINUE
115 CONTINUE
110 CONTINUE
105 CONTINUE
100 CONTINUE
  CALL INTWR2(NOTAPE,IOPTM,NIN)
  ENDFILE NOTAPE
  REWIND NOTAPE
  RETURN
102 FORMAT(1H1,'* ERROR EN LA LECTURA DE LOS INDICES EN EL PERIFERICO
  *NUMERO 24./MINTS/')
109 FORMAT(1H ,20X,'INTEGRALES BIELECTRONICAS'/)
111 FORMAT(1H ,20X,'SE CALCULAN ',F15.0,' INTEGRALES BIELECTRONICAS',//)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

*)
1000 FORMAT(4(1H , ' I J K L '2X,5X,'VALDR',5X))
1001 FORMAT(D15,8)
      END
C      ELEMENT JNVS0704
      SUBROUTINE GINTS(NOTAPE,IOPT)
C
C*
C      CALCULO DE LAS INTEGRALES DE SOLAPAMIENTO
C
C      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON NUMORB,NR,NW,NT
      COMMON/C20/INDI(500),INDJ(500),VALINT(500)
      COMMON/C21/ETA
      COMMON/C23/NINTS,NINTS2
      DIMENSION IOPT(3)
      DIMENSION ETA(30,9)
      WRITE(NW,109)
      NINTS=(NUMORB*NUMORB+NUMORB)/2
      WRITE(NOTAPE,100)NINTS
        WRITE(27,100)NINTS
      WRITE(NW,101)NINTS
C*
C      ESCRITURA DE LAS INTEGRALES SI ASI SE HA INDICADO EN EL PARAMETRO
C      IOPT(1) (VALOR DE IPT(1)=1)
      IOPTG=IOPT(1)
C*
C*
      NIN=0
      ITAG=0
      K=0
      L=0
      DO 50 I=1,NUMORB
      DO 52 J=1,I
      NIN=NIN+1
      INDI(NIN)=I
      INDJ(NIN)=J
      VALINT(NIN)=GSGINT(I,J)
      IF(NIN,NE,500)GO TO 51
      CALL INTWRT(NOTAPE,NIN,IOPTG)
      NIN=0
51 CONTINUE
52 CONTINUE
50 CONTINUE
      CALL INTWRT(NOTAPE,NIN,IOPTG)
      ENDFILE NOTAPE
      REWIND NOTAPE
      RETURN
100 FORMAT(I10)
101 FORMAT(1H ,20X,'SE CALCULAN ',I8,' INTEGRALES DE SOLAPAMIENTO'////)
*)
102 FORMAT(1H1,'* ERROR EN LA LECTURA DE LOS INDICES EN EL PERIFERICO
*NUMERO 24,/GINTS/')
109 FORMAT(1H ,20X,'INTEGRALES DE SOLAPAMIENTO'/)
      END
C      ELEMENT JNVS0711
      SUBROUTINE PACK(I,J,K,L,IJ,KL)
C
C      SUBROUTINA PARA EMPAQUETAR CINCO INDICES DENTRO DE UN REAL
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

I J=I*256+J
KL=K*256+L
RETURN
END
C ELEMENT JNVS0709
SUBROUTINE NORMLS(NUMORB)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/C21/ETA(30,9)
DO 1 I=1,NUMORB
GII=GSGINT(I,I)
IF(GII,EQ,0)GO TO 2
ETA(I,5)=1,0/DSQRT(GII)
2 CONTINUE
1 CONTINUE
RETURN
END
C ELEMENT JNVS0807
FUNCTION GSGINT(I,J)
C
C CALCULO EFECTIVO DE LA INTEGRAL DE SOLAPAMIENTO (I,J)
C
C PARA CADA FUNCION HEMOS ESPECIFICADO X,Y,Z,EXPONENTE,CTE,NORM,
C CS,CPX,CPY,CPZ
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/C21/ETA(30,9)
DIMENSION A(3),B(3),ACOEFS(4),BCOEFS(4),CFLIST(2),ELFNS(2),E(3)
DO 1 M=1,3
A(M)=ETA(I,M)
1 B(M)=ETA(J,M)
ALPHA=ETA(I,4)
BETA=ETA(J,4)
DO 2 M=1,4
M5=M+5
ACOEFS(M)=ETA(I,M5)
2 BCOEFS(M)=ETA(J,M5)
AN=ETA(I,5)
BN=ETA(J,5)
C*
C CALCULO DE LA NUEVA GAUSIANA PRODUCTO DE LAS I PDR J
CALL DIVPT(A,ALPHA,B,BETA,E,EEXP,EFACT)
CALL SHFTCS(ACOEFS,A,E)
CALL SHFTCS(BCOEFS,B,E)
CALL CFSG(ACOEFS,BCOEFS,CFLIST)
CALL ELFNG(EEXP,ELFNS)
GSGINT=SUMG(ELFNS,CFLIST)
GSGINT=GSGINT*AN*BN*EFACT
C*
RETURN
END
C ELEMENT JNVS0808
FUNCTION GSTINT(I,J)
C
C CALCULO DE LA INTEGRAL (I/T/J)
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/C21/ETA(30,9)
DIMENSION A(3),B(3),AB(3),R(3,3),ACOEFS(4),BCOEFS(4),CFLIST(5),
*ELFNS(6)
C*
DO 1 M=1,3
A(M)=ETA(I,M)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

1 B(M)=ETA(J,M)
  ALPHA=ETA(I,4)
  BETA=ETA(J,4)
  DO 2 M=1,4
    M5=M+5
  ACOEFS(M)=ETA(I,M5)
2 BCOEFS(M)=ETA(J,M5)
  AN=ETA(I,5)
  BN=ETA(J,5)
  DO 3 M=1,3
3 AB(M)=B(M)-A(M)
  ABMOD=DSQRT(AB(1)**2+AB(2)**2+AB(3)**2)

```

```

C*
CALL ROTMAT(R,AB,ABMOD)
CALL ROTC(ACOEFS,R)
CALL ROTC(BCOEFS,R)
CALL CFST(ACOEFS,BCOEFS,CFLIST)
CALL ELFNT(ALPHA,BETA,ABMOD,ELFNS)
GSTINT=SUMT(ELFNS,CFLIST)
GSTINT=GSTINT*AN*BN

```

```

C*
RETURN
END

```

```

C
ELEMENT JNVS0809
FUNCTION GSVINT(I,J,VLIST,NOC)

```

```

C
C
C
CALCULO DE LA INTEGRAL (I/V/J)

```

```

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/C21/ETA(30,9)
DIMENSION VLIST(10,4)
DIMENSION A(3),B(3),ACOEFS(4),BCOEFS(4),E(3),EF(3),ACFS
*(4),BCFS(4),R(3,3),CFLIST(4),ELFNS(5)

```

```

C*
DO 1 M=1,3
  A(M)=ETA(I,M)
1 B(M)=ETA(J,M)
  ALPHA=ETA(I,4)
  BETA=ETA(J,4)
  DO 2 M=1,4
    M5=M+5
  ACOEFS(M)=ETA(I,M5)
2 BCOEFS(M)=ETA(J,M5)
  AN=ETA(I,5)
  BN=ETA(J,5)

```

```

C*
GSVINT=0,D0

```

```

C*
CALL DIVPT(A,ALPHA,B,BETA,E,EEXPI,EFACT)
CALL SHFTCS(ACOEFS,A,E)
CALL SHFTCS(BCOEFS,B,E)

```

```

C*
DO 3 M=1,NOC
  DO 4 L=1,3
4 EF(L)=VLIST(M,L)-E(L)
  DO 5 L=1,4
  ACFS(L)=ACOEFS(L)
5 BCFS(L)=BCOEFS(L)
  EFMOD=DSQRT(EF(1)**2+EF(2)**2+EF(3)**2)
  CALL ROTMAT(R,EF,EFMOD)
  CALL ROTC(ACFS,R)
  CALL ROTC(BCFS,R)

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

CALL CFSV(ACFS,BCFS,CFLIST)
CALL ELFNV(EEXP,EFMOD,ELFNS)
3 GSVINT=GSVINT-VLIST(M,4)*SUMV(ELFNS,CFLIST)
C*
GSVINT=AN*BN*EFACT*GSVINT
C*
RETURN
END
C
ELEMENT JNVS0903
FUNCTION GSMINT(I,J,K,L)
C
CALCULO DE LAS INTEGRALES (IJ/KL)
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/C21/ETA(30,9)
DIMENSION A(3),B(3),C(3),D(3),ACOEFS(4),BCOEFS(4),CCOEFS(4),
*DCOEFS(4),E(3),F(3),EF(3)
COMMON/C22/R,CFLIST,T
DIMENSION R(3,3),CFLIST(22),T(10)
C*
DO 1 M=1,3
A(M)=ETA(I,M)
B(M)=ETA(J,M)
C(M)=ETA(K,M)
1 D(M)=ETA(L,M)
ALPHA=ETA(I,4)
BETA=ETA(J,4)
GAMMA=ETA(K,4)
DELTA=ETA(L,4)
DO 2 M=1,4
M5=M+5
ACOEFS(M)=ETA(I,M5)
BCOEFS(M)=ETA(J,M5)
CCOEFS(M)=ETA(K,M5)
2 DCOEFS(M)=ETA(L,M5)
AN=ETA(I,5)
BN=ETA(J,5)
CN=ETA(K,5)
DN=ETA(L,5)
C*
CALL DIVPT(A,ALPHA,B,BETA,E,EX,EN)
CALL DIVPT(C,GAMMA,D,DELTA,F,FX,FN)
C*
CALL SHFTCS(ACOEFS,A,E)
CALL SHFTCS(BCOEFS,B,E)
CALL SHFTCS(CCOEFS,C,F)
CALL SHFTCS(DCOEFS,D,F)
C*
DO 3 M=1,3
3 EF(M)=F(M)-E(M)
C*
EFMOD=DSQRT(EF(1)**2+EF(2)**2+EF(3)**2)
C*
CALL RMA1(EF,EFMOD)
C*
CALL ROTCS1(ACOEFS)
CALL ROTCS1(BCOEFS)
CALL ROTCS1(CCOEFS)
CALL ROTCS1(DCOEFS)
C*
CALL CFS2L(ACOEFS,BCOEFS,CCOEFS,DCOEFS)
C*

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

CALL ELFN2L(EX,FX,EFMOD)
C*
CALL SUM2L(RAWINT)
GSMINT=RAWINT*AN*BN*CN*DN*EN*FN
RETURN
END
C
ELEMENT JNVS0702
SUBROUTINE DIVPT(A,ALPHA,B,BETA,ECOORD,EEXP,EFACT)
C
C   CALCULO DEL CENTRO, EXPONENTE Y DEL FACTOR MULTIPLICATIVO DE LA
C   GAUSIANA QUE REEMPLAZA AL PRODUCTO DE DOS GAUSIANAS DE CENTROS
C   A Y B, Y DE EXPONENTES ALPHA Y BETA.
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION A(3),B(3),ECOORD(3)
C*
DO 1 I=1,3
1 ECOORD(I)=(ALPHA*A(I)+BETA*B(I))/(ALPHA+BETA)
EEXP=ALPHA+BETA
ABSQD=0,DO
DO 2 I=1,3
2 ABSQD=ABSQD+(B(I)-A(I))*(B(I)-A(I))
EFACT=DEXP(-ALPHA*BETA*ABSQD/(ALPHA+BETA))
C*
RETURN
END
C
ELEMENT JNVS0713
SUBROUTINE SHFTCS(COEFS,A,E)
C
C   CALCULA LOS NUEVOS COEFICIENTES CUANDO UNA GAUSIANA CENTRADA EN
C   A ES LLEVADA A E,
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION COEFS(4),A(3),E(3)
C*
DO 1 I=1,3
I1=I+1
1 COEFS(I)=COEFS(I)+COEFS(I1)*(E(I)-A(I))
C*
RETURN
END
C
ELEMENT JNVS0812
SUBROUTINE ROTMAT(R,EF,EFMOD)
C
C   CALCULO DE LA MATRIZ DE ROTACION R QUE TRANSFORMA EF DE FORMA QUE
C   COINCIDA CON EL EJE Z.
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION COEFS(4),TEMPCS(3)
DIMENSION R(3,3),EF(3),EFN(3)
C
IF(EFMOD=0,000001)2,2,3
C*
3 DO 1 I=1,3
1 EFN(I)=EF(I)/EFMOD
R(1,1)=EFN(2)-EFN(3)
R(1,2)=EFN(3)-EFN(1)
R(1,3)=EFN(1)-EFN(2)
R1NF=1,000/(DSQRT(R(1,1)*R(1,1)+R(1,2)*R(1,2)+R(1,3)*R(1,3)))
DO 4 I=1,3
4 R(1,I)=R(1,I)*R1NF
EFSUM=EFN(1)+EFN(2)+EFN(3)
R(2,1)=1,000-EFN(1)*EFSUM

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

R(2,2)=1,0D0-EFN(2)*EFSUM
R(2,3)=1,0D0-EFN(3)*EFSUM
R2NF=1,0D0/(DSQRT(R(2,1)*R(2,1)+R(2,2)*R(2,2)+R(2,3)*R(2,3)))
DO 5 I=1,3
5 R(2,I)=R(2,I)*R2NF
R(3,1)=EFN(1)
R(3,2)=EFN(2)
R(3,3)=EFN(3)
C*
RETURN
2 DO 6 I=1,3
DO 7 J=1,3
7 R(I,J)=0,DO
6 R(I,I)=1,0D0
RETURN
END
C
ELEMENT JNVS0811
SUBROUTINE ROTC(COEF5,R)
C
C CALCULO DEL CAMBIO EN LOS COEFICIENTES CUANDO LAS COORDENADAS SON
C ROTADAS POR LA MATRIZ R,
C
C -----
C IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION R(3,3),COEFS(4),TEMPCS(3)
C*
DO 8 I=1,3
TEMPCS(I)=0,DO
DO 9 J=1,3
J1=J+1
9 TEMPCS(I)=TEMPCS(I)+R(I,J)*COEFS(J1)
8 CONTINUE
COEFS(2)=TEMPCS(1)
COEFS(3)=TEMPCS(2)
COEFS(4)=TEMPCS(3)
RETURN
END
C
ELEMENT JNVS0906
SUBROUTINE RMAT1(EF,EFMOD)
C
C CALCULA LA MATRIZ R QUE TRANSFORMA EF EN EL EJE Z
C LOS RESULTADOS SE GUARDAN EN R
C IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/C22/R,CFLIST,T
DIMENSION R(3,3),CFLIST(22),T(10)
DIMENSION COEFS(4),TEMPCS(3)
DIMENSION EF(3),EFN(3)
IF(EFMOD=0,000001)2,2,3
3 DO 1 I=1,3
1 EFN(I)=EF(I)/EFMOD
R(1,1)=EFN(2)-EFN(3)
R(1,2)=EFN(3)-EFN(1)
R(1,3)=EFN(1)-EFN(2)
R1NF=1,DO/(DSQRT(R(1,1)*R(1,1)+R(1,2)*R(1,2)+R(1,3)*R(1,3)))
DO 4 I=1,3
4 R(1,I)=R(1,I)*R1NF
EFSUM=EFN(1)+EFN(2)+EFN(3)
R(2,1)=1,DO-EFN(1)*EFSUM
R(2,2)=1,DO-EFN(2)*EFSUM
R(2,3)=1,DO-EFN(3)*EFSUM
R2NF=1,DO/(DSQRT(R(2,1)*R(2,1)+R(2,2)*R(2,2)+R(2,3)*R(2,3)))
DO 5 I=1,3

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

5 R(2,1)=R(2,1)*R2NF
  R(3,1)=EFN(1)
  R(3,2)=EFN(2)
  R(3,3)=EFN(3)
  RETURN

```

```

2 DO 6 I=1,3
  DO 7 J=1,3
  7 R(I,J)=0,DO
  6 R(I,I)=1,DO
  RETURN
  END

```

```

C ELEMENT JNVS0907
C SUBROUTINE ROTCS1(COEF5)

```

```

C CALCULO DEL CAMBIO EN LOS COEFICIENTES CUANDO LAS COORDENADAS
C SE ROTAN POR LA MATRIZ R
C -----

```

```

C IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C COMMON/C22/R(3,3),CFLIST(22),T(10)
C DIMENSION COEF5(4),TEMPCS(3),EF(3),EFN(3)

```

```

C DO 8 I=1,3
  TEMPCS(I)=0,DO
  DO 9 J=1,3
    J1=J+1
  9 TEMPCS(I)=TEMPCS(I)+R(I,J)*COEF5(J1)
  8 CONTINUE
  COEF5(2)=TEMPCS(1)
  COEF5(3)=TEMPCS(2)
  COEF5(4)=TEMPCS(3)
  RETURN
  END

```

```

C ELEMENT JNVS0703
C FUNCTION FMCH(MVAR,XVAR)

```

```

C ESTA SUBROUTINA CALCULA LA INTEGRAL DE 0 A 1 DE
C (U**(2*M))*DEXP(-X*(U**2))

```

```

C LA PRECISION ES MEJOR QUE 7 CIFRAS SIGNIFICATIVAS PARA M MENOR QUE J
C CINCO,

```

```

C EL METODO USADO ES UNA EXPANSION EN SERIES INFINITAS EN X Y 1/X, LA
C PRIMERA SERIE USADA CUANDO X ES MENOR QUE 9,0
C IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C M=MVAR
C X=XVAR

```

```

C IF(X-9,0D0)10,10,20

```

```

C* SI X ES MENOR O IGUAL QUE 9,0
C

```

```

10 A=M
  A=A+0,5
  TERM=1,DO/A
  PTLSUM=TERM
  DO 11 I=2,50
    A=A+1,0
    TERM=TERM*X/A
    PTLSUM=PTLSUM+TERM
    TDIVP=TERM/PTLSUM
    IF(TDIVP-0,00000001)12,11,11
  11 CONTINUE
  WRITE(NW,999)M,X

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

12 FMCH=0,5*PTLSUM*DEXP(-X)
   RETURN
C
C*
C   X MAYOR QUE 9,0
20 A=M
   B=A+0,5
   A=A-0,5
   APPROX=0,88622692/(DSQRT(X)*X**M)
   IF(M)21,23,21
21 DO 22 I=1,M
   B=B-1,0
22 APPROX=APPROX*B
23 FIMULT=0,5*DEXP(-X)/X
   FIPROP=FIMULT/APPROX
   TERM=1,0D0
   PTLSUM=TERM
   NOTRMS=X
   NOTRMS=NOTRMS+M
   DO 24 I=2,NOTRMS
   TERM=TERM*A/X
   PTLSUM=PTLSUM+TERM
   TFP=TERM*FIPROP/PTLSUM
   IF(DABS(TFP)-0,00000001)25,25,24
24 A=A-1,0
   WRITE(NW,999)M,X
25 FMCH=APPROX-FIMULT*PTLSUM
   RETURN
999 FORMAT(1H ,1*** NO CONVERGE EL CALCULO DE LA FUNCION ERROR,1H ,20J
   *X,'NUMERO DE ITERACIONES REALIZADAS=',I6/1H ,20X,'VALOR DE LA FUNC
   *ION EN EL MOMENTO DE LA INTERRUPCION =',D15,8/////)
   END
C   ELEMENT JNVS0801
   SUBROUTINE CFSG(ACOEFS,BCOEFS,CFLIST)
C
C   CALCULO DE LOS COEFICIENTES CSSCXXYYZZ DE LOS COMPONENTES DISTIN-
C   TOS DE CERO DE LA INTEGRAL DE SOLAPAMIENTO (I/J)
C
   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
   DIMENSION ACOEFS(4),BCOEFS(4),CFLIST(2)
   CFLIST(1)=ACOEFS(1)*BCOEFS(1)
   CFLIST(2)=ACOEFS(2)*BCOEFS(2)+ACOEFS(3)*BCOEFS(3)+
   *   ACOEFS(4)*BCOEFS(4)
   RETURN
   END
C   ELEMENT JNVS0804
   SUBROUTINE ELFNG(EEXP,ELFNS)
C
   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
   DIMENSION ELFNS(2)
   DATA PI/3,1415926535897932/
   DATA SQRTPI/1,7724538509055160/
   DATA SQRT2/1,4142135623730950/
   ELFNS(1)=2,0D0*EEXP
   FACT=2,*SQRT2*PI*SQRTPI
   ELFNS(2)=FACT/(ELFNS(1)*DSQRT(ELFNS(1)))
   RETURN
   END
C   ELEMENT JNVS0813
   FUNCTION SUMG(ELFNS,CFLIST)
   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
   DIMENSION ELFNS(2),CFLIST(2)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

SUMG=(CFLIST(1)+CFLIST(2)/ELFNS(1))*ELFNS(2)

RETURN

END

C ELEMENT JNVS0802

SUBROUTINE CFST(ACOEFS,BCOEFS,CFLIST)

C CALCULA LOS COEFICIENTES DE LOS VARIOS TIPOS DE INTEGRALES EN EL
 C ORDEN SS,ZS,SZ,ZZ,XX+YY,
 C

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)

DIMENSION ACOEFS(4),BCOEFS(4),CFLIST(5)

CFLIST(1)=ACOEFS(1)*BCOEFS(1)

CFLIST(2)=ACOEFS(4)*BCOEFS(1)

CFLIST(3)=ACOEFS(1)*BCOEFS(4)

CFLIST(4)=ACOEFS(4)*BCOEFS(4)

CFLIST(5)=ACOEFS(2)*BCOEFS(2)+ACOEFS(3)*BCOEFS(3)

RETURN

END

C ELEMENT JNVS0805

SUBROUTINE ELFNT(ALPHA,BETA,ABMOD,ELFNS)

C CALCULA LAS FUNCIONES ELEMENTALES USADAS PARA LAS INTEGRALES
 C (I/T/J)
 C

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)

DIMENSION ELFNS(6)

DATA PI/3,1415926535897932/

DATA SQRTPI/1,7724538509055160/

DATA SQRT2/1,4142135623730950/

ELFNS(1)=ABMOD

ELFNS(2)=2,0*ALPHA

ELFNS(3)=2,0*BETA

ELFNS(4)=ELFNS(2)+ELFNS(3)

ELFNS(5)=ELFNS(2)*ELFNS(3)/ELFNS(4)*ELFNS(1)**2

FACT=PI*SQRTPI*SQRT2

ELFNS(6)=FACT*ELFNS(2)*ELFNS(3)*ELFNS(4)**(-3,5)

* *DEXP(-0,5*ELFNS(5))

RETURN

END

C ELEMENT JNVS0814

FUNCTION SUMT(ELFNS,CFLIST)

C CALCULA LA INTEGRAL (I/T/J) A PARTIR DE ELFNS Y CFLIST
 C

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)

DIMENSION ELFNS(6),CFLIST(5)

SUMT=0,D0

DO 11 M=1,5

IF(CFLIST(M))12,11,12

12 GO TO (1,2,3,4,5),M

1 PRTINT=ELFNS(4)*(3,0-ELFNS(5))

GO TO 10

2 PRTINT=ELFNS(1)*ELFNS(3)*(5,0-ELFNS(5))

GO TO 10

3 PRTINT=-ELFNS(1)*ELFNS(2)*(5,0-ELFNS(5))

GO TO 10

4 PRTINT=5,0-ELFNS(5)*(8,0-ELFNS(5))

GO TO 10

5 PRTINT=5,0-ELFNS(5)

10 SUMT=SUMT+CFLIST(M)*PRTINT

11 CONTINUE

SUMT=SUMT*ELFNS(6)

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

RETURN
END
C ELEMENT JNVS0803
SUBROUTINE CFSV(ACFS,BCFS,CFLIST)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION ACFS(4),BCFS(4),CFLIST(4)
CFLIST(1)=ACFS(1)*BCFS(1)
CFLIST(2)=ACFS(1)*BCFS(4)+ACFS(4)*BCFS(1)
CFLIST(3)=ACFS(4)*BCFS(4)
CFLIST(4)=ACFS(2)*BCFS(2)+ACFS(3)*BCFS(3)
RETURN
END
C ELEMENT JNVS0806
SUBROUTINE ELFNV(EEXP,EFMOD,ELFNS)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION ELFNS(5)
ELFNS(1)=EEXP
ELFNS(2)=EFMOD
X=EEXP*EFMOD**2
EXPMX=DEXP(-X)
ELFNS(5)=FMCH(2,X)
ELFNS(4)=-2,0*X*ELFNS(5)+EXPMX)/3,0
ELFNS(3)=-2,0*X*ELFNS(4)+EXPMX
RETURN
END
C ELEMENT JNVS0815
FUNCTION SUMV(ELFNS,CFLIST)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION ELFNS(5),CFLIST(4)
DATA PI/3,1415926535897932/
DATA PI2/6,2831853071795864/
SUMV=0,DO
DO 11 M=1,4
IF(CFLIST(M))12,11,12
12 GO TO (1,2,3,4),M
1 PRTINT=PI2/ELFNS(1)*ELFNS(3)
GO TO 10
2 PRTINT=-PI2/ELFNS(1)*ELFNS(2)*ELFNS(4)
GO TO 10
3 PRTINT=(ELFNS(3)+ELFNS(4)+2,0*ELFNS(1)*ELFNS(2)**2*ELFNS(5))*
*PI/ELFNS(1)**2
GO TO 10
4 PRTINT=PI/ELFNS(1)**2*(ELFNS(3)+ELFNS(4))
10 SUMV=SUMV+CFLIST(M)*PRTINT
11 CONTINUE
RETURN
END
C ELEMENT JNVS0901
SUBROUTINE CFS2L(ACOEFS,BCOEFS,CCOEFS,DCOEFS)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION ACOEFS(4),BCOEFS(4),CCOEFS(4),DCOEFS(4),A(4),B(4),C(4),
*D(4)
COMMON/C22/R,CFLIST,T
DIMENSION R(3,3),CFLIST(22),T(10)
DO 1 M=1,4
A(M)=ACOEFS(M)
B(M)=BCOEFS(M)
C(M)=CCOEFS(M)
1 D(M)=DCOEFS(M)
SE=A(1)*B(1)
ZE=A(1)*B(4)+A(4)*B(1)
XE=A(1)*B(2)+A(2)*B(1)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

YE=A(1)*B(3)+A(3)*B(1)
ZZE=A(4)*B(4)
XZE=A(2)*B(4)+A(4)*B(2)
XXE=A(2)*B(2)
YZE=A(3)*B(4)+A(4)*B(3)
YXE=A(3)*B(2)+A(2)*B(3)
YYE=A(3)*B(3)

```

C*

```

SF=C(1)*D(1)
ZF=C(1)*D(4)+C(4)*D(1)
XF=C(1)*D(2)+C(2)*D(1)
YF=C(1)*D(3)+C(3)*D(1)
ZZF=C(4)*D(4)
XZF=C(2)*D(4)+C(4)*D(2)
XXF=C(2)*D(2)
YZF=C(3)*D(4)+C(4)*D(3)
YXF=C(3)*D(2)+C(2)*D(3)
YYF=C(3)*D(3)

```

C*

```

CFLIST(1)=SE*SF
CFLIST(2)=ZE*SF
CFLIST(3)=SE*ZF
CFLIST(4)=ZE*ZF
CFLIST(5)=ZZE*SF
CFLIST(6)=SE*ZZF
CFLIST(7)=ZZE*ZF
CFLIST(8)=ZE*ZZF
CFLIST(9)=ZZE*ZZF
CFLIST(10)=XE*XF+YE*YF
CFLIST(11)=XZE*XF+YZE*YF
CFLIST(12)=XE*XZF+YE*YZF
CFLIST(13)=XZE*XZF+YZE*YZF
CFLIST(14)=XXE*SF+YYE*SF
CFLIST(15)=SE*XXF+SE*YYF
CFLIST(16)=XXE*ZF+YYE*ZF
CFLIST(17)=ZE*XXF+ZE*YYF
CFLIST(18)=XXE*ZZF+YYE*ZZF
CFLIST(19)=ZZE*XXF+ZZE*YYF
CFLIST(20)=XXE*XXF+YYE*YYF
CFLIST(21)=YXE*YXF
CFLIST(22)=YYE*XXF+XXE*YYF
RETURN
END

```

C

```

ELEMENT JNVS0902
SUBROUTINE ELFN2L(EX,FX,EFMOD)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/C22/R,CFLIST,T
DIMENSION R(3,3),CFLIST(22),T(10)
DATA SQRTPI/1.7724538509055160/
DATA PI/SQRT/9.8696044010893586/
T(2)=EX
T(3)=FX
T(4)=T(2)*T(3)/(T(2)+T(3))
FACT=2.*SQRTPI*PI/SQRT
T(1)=FACT/DSQRT(T(2)+T(3))
T(5)=EFMOD
X=T(4)*T(5)*T(5)
T(10)=FMCH(4,X)
EXPMX=DEXP(-X)
T(9)=-(-2.0*X*T(10)+EXPMX)/7.0
T(8)=-(-2.0*X*T(9)+EXPMX)/5.0
T(7)=-(-2.0*X*T(8)+EXPMX)/3.0

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

T(6)=-2,0*X*T(7)+EXPMX
RETURN
END
C. ELEMENT JNVS0908
SUBROUTINE SUM2L(RAWINT)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/C22/R(3,3),CFLIST(22),T(10)
RAWINT=0,D0
DO 50 M=1,22
IF(CFLIST(M))30,50,30
30 GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,
*      21,22),M
1 PRTINT=T(6)
GO TO 40
2 PRTINT=-T(4)*T(5)*T(7)/T(2)
GO TO 40
3 PRTINT=T(4)*T(5)*T(7)/T(3)
GO TO 40
4 PRTINT=-((0,5*T(7)+T(4)*T(5)**2*T(8))*T(4)/(T(2)*T(3)))
GO TO 40
5 PRTINT=0,5*(T(6)+T(4)/T(2)*(T(7)+2,0*T(5)**2*T(8)*T(4)))/T(2)
GO TO 40
6 PRTINT=0,5*(T(6)+T(4)/T(3)*(T(7)+2,0*T(5)**2*T(8)*T(4)))/T(3)
GO TO 40
7 PRTINT=T(4)*T(5)/(T(2)*T(3))*((0,5*T(7)+T(4)/T(2)*(1,5*T(8)+
*      T(4)*T(5)**2*T(9)))
GO TO 40
8 PRTINT=-T(4)*T(5)/(T(2)*T(3))*((0,5*T(7)+T(4)/T(3)*(1,5*T(8)+
*      T(4)*T(5)**2*T(9)))
GO TO 40
9 PRTINT=0,25/(T(2)*T(3))*((T(6)+T(7)+2,0*T(4)*T(5)**2*T(8)+
*      T(4)**2/(T(2)*T(3))*(3,0*T(8)+4,0*T(4)*T(5)**2*
*      (3,0*T(9)+T(4)*T(5)**2*T(10))))
GO TO 40
10 PRTINT=-0,5*T(4)*T(7)/(T(2)*T(3))
GO TO 40
11 PRTINT=0,5*T(4)**2*T(5)*T(8)/(T(2)**2*T(3))
GO TO 40
12 PRTINT=-0,5*T(4)**2*T(5)*T(8)/(T(2)*T(3)**2)
GO TO 40
13 PRTINT=0,25*T(4)**2/((T(2)*T(3))**2)*(T(8)+2,0*T(4)*T(5)**2*T(9))
GO TO 40
14 PRTINT=0,5/T(2)*(T(6)+T(4)*T(7)/T(2))
GO TO 40
15 PRTINT=0,5/T(3)*(T(6)+T(4)*T(7)/T(3))
GO TO 40
16 PRTINT=0,5*T(4)*T(5)/(T(2)*T(3))*(T(7)+T(4)*T(8)/T(2))
GO TO 40
17 PRTINT=-0,5*T(4)*T(5)/(T(2)*T(3))*(T(7)+T(4)*T(8)/T(3))
GO TO 40
18 PRTINT=0,25/(T(2)*T(3))*((T(6)+T(7)+T(4)**2/(T(2)*T(3))
*      *(T(8)*(2,0*T(2)*T(5)**2+1,0)+2,0*T(4)*T(5)**2*T(9)))
GO TO 40
19 PRTINT=0,25/(T(2)*T(3))*((T(6)+T(7)+T(4)**2/(T(2)*T(3))
*      *(T(8)*(2,0*T(3)*T(5)**2+1,0)+2,0*T(4)*T(5)**2*T(9)))
GO TO 40
20 PRTINT=0,25/(T(2)*T(3))*((T(6)+T(7)+3,0*T(4)**2*T(8)/(T(2)*T(3)))
GO TO 40
21 PRTINT=0,25*T(8)*(T(4)/(T(2)*T(3)))**2
GO TO 40
22 PRTINT=0,25/(T(2)*T(3))*((T(6)+T(7)+T(4)**2*T(8)/(T(2)*T(3)))
GO TO 40

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

40 RAWINT=RAWINT+PRTINT*CFLIST(M)
50 CONTINUE
   RAWINT=RAWINT*T(1)/(T(2)*T(3))
   RETURN
   END

```

C ELEMENT JNVS0611
 C SUBROUTINE STOP1
 C SUBROUTINA PARA ESCRIBIR LOS DATOS INTERMEDIOS DE LOS CALCULOS REALI-
 C ZADOS HASTA EL MOMENTO,
 C ESTA PENSADA PARA UN PROCESO DE RESTART SOBRE LA SUBROUTINA REINI1
 C SE ESCRIBEN LOS DATOS QUE LUEGO SON LEIDOS POR REINI1 EN EL
 C PERIFERICO NITAPE

```

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
WRITE(NW,1000)
REWIND 27
STOP

```

```

1000 FORMAT(1H1,'FINAL DEL PROCESO DE ESCRITURA DE LOS DATOS SOBRE EL  

*PERIFERICO NITAPE ' /1H,'FINAL DEL PROCESO')
END

```

C ELEMENT JNVS1101
 C SUBROUTINE CLOSED(VNN)

C* ESTA SUBROUTINA GESTIONA EL CALCULO AUTOCONSISTENTE ,CAPAS CERRADAS
 C ,DEL PROGRAMA,
 C COMO RESULTADO DE LA MISMA, OBTENEMOS LA ENERGIA ELECTRONICA TOTAL,
 C LAS ENERGIAS ORBITALES Y LOS COEFICIENTES DE LOS VECTORES PROPIOS
 C EN FORMA DE UNA MATRIZ,
 C EL METODO DE CALCULO ES EL PROPUESTO POR C,C,J. Roothaan,
 C REV, MOD, PHYS, 23,69(1951)

C* EN ESTE GRUPO DE PROGRAMAS HEMOS USADO LOS ARCHIVOS: 9,11,21

NUMERO	TIPO	UTILIDAD
*****	*****	*****
9	SEC,	INT, BIELECTR,
11	SEC,	MATRIZ G

C ES NECESARIO CONOCER:

- - H; SUPERVECTOR DE LA PARTE MONOELECTRONICA DELI
 - OPERADOR DE FOCK
 - C; MATRIZ C DE VECTORES PROPIOS INICIAL
 - S**(-1/2)
 - (INDICES-INTEGRALES BIELECTRONICAS)
 - INTEGRALES T
- COMMON C19
 COMMON C8
 PER, 18
 PER, 9
 PER, 8

C LOS DATOS DE ENTRADA LEIDOS PARA ESTE GRUPO DE PROGRAMAS SON:
 C -NUMERO DE PARES DE ELECTRONES, NPE (FORMATO 12)

```

-----
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/A/IWAY(10)
COMMON/START/NNRNW
COMMON/ACELE/IACEL
COMMON/C2/ANOC(30),NPE
COMMON/C3/EP5,EPSENT,EPSENO,EPSCOE
COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

COMMON/C7/A(465),B(465)
COMMON/C8/C(30,30)
COMMON/C10/AA(30,30),OM(465)
COMMON/C12/BB(30),E
COMMON/C13/R(30,30)
COMMON/C19/H(465)
COMMON/C20/I1J(500),IKL(500),VALINT(500)
DIMENSION NOC(30)

C*
C      -IWAY(1):INDICA EL CAMINO DENTRO DE LA PARTE CLOSED-RHF
C      *IWAY(1)=0-->EJECUCION NORMAL
C      *IWAY(1)=1-->PROCESO RESTART RHF SOBRE LA SUB, REINI2
C
      IREF=IWAY(1)
      IREF=IREF+1
      GO TO (1000,1001),IREF
C
1001 CALL REINI2(VNN,NUMC,NUMO1,NUMO,NOC1,NOC2)
      GO TO 1002
1000 CONTINUE
      IF(IWAY(3),EQ,2)GO TO 5
      WRITE(NW,110)
C      LEAMOS EL NUMERO DE PARES DE ELECTRONES(NPE)
      READ(NR,105)NPE
      WRITE(NW,107)NPE
      WRITE(NW,106)NUMORB,NPE
      5 CONTINUE
C*
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      ITE=0
      NU=1
C      : : : :
      10 CONTINUE
C      : : : :
      1002 CONTINUE
C      : : : :
C      : : : : ,CALCULO DE LA MATRIZ R
C      CALL RMAT(NPE,NUMORB)
C      : : : :
C      : : : : ,CALCULO DE LA ENERGIA
C      CALL ENERGY(E,ITE)
C      ESCRIBIMOS LOS RESULTADOS INTERMEDIOS DE CADA ITERACION-ENERGIAS
C      ORBITALES Y MATRIZ DE COEFICIENTES-SIEMPRE QUE IR SEA DISTINTO
C      DE CERO Y,SEGUN EL VALOR DE IR
C      : : : :
      IF(IWAY(3),NE,0)GO TO 6
      IF(IR,NE,0)CALL RESULT(IR)
      6 CONTINUE
C      : : : :
C      : : : : ,COMPROBAMOS SI HA CONVERGIDO LA ITERACION,EN ESE CASO NU=0
C      EN CASO CONTRARIO NU=1
C      : : : :
      IF(ITE,EQ,0)GO TO 1
      CALL CRITER(NU,ITE)
      IF(NU,EQ,0)GO TO 20
      1 CONTINUE
C      : : : :
C      : : : : ,CALCULO DE G Y F

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C
C   CALL FFORMC
C
C   C,,,,,DIAGONALIZACION DEL SISTEMA F1*D=D*E
C   F1=S**(-1/2)*F*S**(-1/2)
C   D=S**(1/2)*C
C
C   CALL CDIAG
C   ITE=ITE+1
C   IF(ITE=NUMITE)10,10,30
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
30 WRITE(NW,100)ITE,E
   RETURN
20 CONTINUE
   WRITE(NW,108)ITE,E
   CALL PRINTC(VNN,ITE,E)
   RETURN
100 FORMAT(1H1,60(1H*)/1H ,10X,'NO HA CONVERGIDO EL PROCESO EN ',I4,
   *ITERACIONES'/1H ,10X,'LA ENERGIA EN ESE MOMENTO ES DE ',D15,8,' UN-
   *IDADES ATOMICAS'/1H ,60(1H*)/1H1)
105 FORMAT(I2)
106 FORMAT(1H ,10X,'EL ESTADO ELECTRONICO DE LA MOLECULA ES UN SINGLET
   *E FUNDAMENTAL'/1H ,10X,'EL NUMERO DE MOS ES DE ',I2,' DE LOS CUAL
   *ES LOS ',I2,' MAS ESTABLES ESTAN DOBLE-OCUPADOS'//)
107 FORMAT(1H ,10X,'EL NUMERO DE PARES DE ELECTRONES ES =',I2//)
108 FORMAT(1H ,10X,'*** DATOS AL LLEGAR A LA CONVERGENCIA ***'/1H ,15X
   *.,NUMERO DE ITERACIONES =',I4/1H ,15X,'ENERGIA ELECTRONICA FINAL =
   *',D15,8,' A, U, '//)
110 FORMAT(1H1,20X,60(1H*)/1H ,20X,' COMIENZA EL PROCESO DE AUTOCONSIS
   *TENCIA PARA CAPAS CERRADAS,/1H ,20X,60(1H*)//)
120 FORMAT(1H ,10X,'** EN LA ITERACION ',I4,' LA ENERGIA ELECTRONICA
   * TOTAL ES DE ',D15,8,' UNIDADES ATOMICAS'//)
   END
C   ELEMENT JNVS0608
C   SUBROUTINE REINI1
C   SUBROUTINA PARA REINICIAR EL PROCESO SOBRE EL GRUPO DE PROGRAMAS
C   SCF, ESTO SE HACE LEYENDO LOS DATOS NECESARIOS A PARTIR DEL PE-
C   FERICO NITAPE CUYA UNIDAD LOGICA SE LEE POR LA LECTORA,
C
C   LOS DATOS DE ENTRADA PARA ESTE RESTART SON:
C   -NUMERO DE LA UNIDAD LOGICA POR LA QUE SE LISTAN LOS RESULTA-
C   DOS(FORMATO I2)
C   -TITULO(FORMATO 10A8)
C   -NUMERO DE ORBITALES(FORMATO I2)
C   -NUMERO DE NUCLEOS(I2)
C   -NUMERO ATOMICO,COORDENADAS(X,Y,Z)(I5,3D20,11)
C   -NUMERO DE NUCLEOS,TIPO DE ORBITAL,COORD.(X,Y,Z) DE CADA ORBIT
C   AL(I3,I2,4(D15,8))
C   -NUMERO DE INTEGRALES MONOELECTRONICAS(I10)
C   -INTEGRALES S,T,V,H(500D15,8)
C   -NUMERO DE INTEGRALES BIELECTRONICAS(D15,8)
C   -INTEGRALES BIELECTRONICAS(INDICE(I,J,K,L)-INTEGRAL)(500(4I3,
C   D15,8))
C
C   -----
C   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C   COMMON NUMORB,NR,NW,NT
C   COMMON/A/IWAY(10)
C   COMMON/START/NITAPE
C   COMMON/C1/DNUCL,IZ,NUMNUC
C   COMMON/C11/DBORB(30,4),NNUCL(30),ITORB(30)
C   COMMON/C19/HH(465)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

COMMON/C20/II(500),JJ(500),H(500)
COMMON/C24/KK(500),LL(500)
DIMENSION DNUCL(10,3),IZ(10)
DIMENSION TITOL(10)
C*
C* LECTURA DE LOS DATOS
C*
C
C LEEMOS LOS DATOS DEL PROCESO A REALIZAR
C
NITAPE=27
C* LEEMOS LOS DATOS DEL PERIFERICO DE ENTRADA
C LEEMOS LOS DATOS DEL PERIFERICO DE SALIDA
READ(NITAPE,100)NR,NW
C LEEMOS EL TITULO DEL NUEVO PROGRAMA
READ(NITAPE,103)TITOL
C LEEMOS LOS DATOS DE LOS COMMONS
C
READ(NITAPE,100)NUMORB,NUMNUC
NT=(NUMORB*NUMORB+NUMORB)/2
DO 5 I=1,NUMNUC
5 READ(NITAPE,101)IZ(I),(DNUCL(I,J),J=1,3)
DO 9 I=1,NUMORB
9 READ(NITAPE,107)NNUCL(I),ITORB(I),(DBORB(I,J),J=1,4)
C*
C* ESCRITURA DE LOS DATOS DEL PROCESO
WRITE(NW,104)(TITOL(I),I=1,10)
WRITE(NW,106)NITAPE,NW
WRITE(NW,124)
WRITE(NW,108)NUMNUC
DO 7 I=1,NUMNUC
7 WRITE(NW,109)I,IZ(I)
WRITE(NW,117)
DO 6 I=1,NUMNUC
6 WRITE(NW,118)(DNUCL(I,J),J=1,3)
WRITE(NW,122)
WRITE(NW,111)NUMORB
WRITE(NW,129)
DO 10 I=1,NUMORB
10 WRITE(NW,123)NNUCL(I),ITORB(I),(DBORB(I,J),J=1,4)
C LEEMOS EL SUPERVECTOR S(EN H)
READ(NITAPE,120)NINTSS
READ(NITAPE,121)(H(I),I=1,NINTSS)
NOTAPE=20
WRITE(NOTAPE,120)NINTSS
WRITE(NOTAPE,121)(H(I),I=1,NINTSS)
WRITE(NW,114)NINTSS
WRITE(NW,116)(H(I),I=1,NINTSS)
ENDFILE NOTAPE
REWIND NOTAPE
C LEEMOS EL SUPERVECTOR T(EN H)
NINTST=NINTSS
READ(NITAPE,121)(H(I),I=1,NINTST)
NOTAPE=8
WRITE(NOTAPE,120)NINTST
WRITE(NOTAPE,121)(H(I),I=1,NINTST)
WRITE(NW,113)NINTST
WRITE(NW,116)(H(I),I=1,NINTST)
ENDFILE NOTAPE
REWIND NOTAPE
C LEEMOS EL VECTOR V
READ(NITAPE,121)(H(I),I=1,NINTSS)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

NOTAPE=25
WRITE(NOTAPE,120)NINTSS
WRITE(NOTAPE,121)(H(I),I=1,NINTSS)
  WRITE(NW,125)NINTSS
WRITE(NW,116)(H(I),I=1,NINTSS)
ENDFILE NOTAPE
REWIND NOTAPE
C LEEMOS EL SUPERVECTOR H
NOTAPE=21
NINTSH=NINTSS
WRITE(NOTAPE,120)NINTSH
READ(NOTAPE,121)(HH(I),I=1,NINTSH)
WRITE(NOTAPE,121)(HH(I),I=1,NINTSH)
  WRITE(NW,126)NINTSH
WRITE(NW,116)(HH(I),I=1,NINTSH)
ENDFILE NOTAPE
REWIND NOTAPE
C *****
C LEEMOS LAS INTEGRALES BIELECTRONICAS EN GRUPOS DE 500(INDICES=
C INTEGRALES)
C *****
READ(NOTAPE,127)RNINTS
  WRITE(NW,115)RNINTS
NOTAPE=9
WRITE(NOTAPE,127)RNINTS
C
NFORM=500
RNV=RNINTS/FLOAT(NFORM)
IF(RNV,LT,1,)GO TO 8
RCOUNT=1,
2 CONTINUE
RCOUNT=RCOUNT+1,
  I1=1
  I2=NFORM
  WRITE(NW,128)I1,I2
  READ(NOTAPE,131)((II(M),JJ(M),KK(M),LL(M),H(M)),M=I1,I2)
  IF(II(I1),EQ,0,)GO TO 1
  WRITE(NOTAPE,131)((II(M),JJ(M),KK(M),LL(M),H(M)),M=I1,I2)
  IF(RCOUNT,LT,RNV)GO TO 2
8 CONTINUE
C
NV=RNV
NCALC=NV*NFORM
NREST=RNINTS-FLOAT(NCALC)
IF(NREST,EQ,0) GO TO 3
  I1=1
  NINTSB=NREST
  WRITE(NW,128)I1,NINTSB
  READ(NOTAPE,131)((II(M),JJ(M),KK(M),LL(M),H(M)),M=I1,NINTSB)
  WRITE(NOTAPE,131)((II(M),JJ(M),KK(M),LL(M),H(M)),M=I1,NINTSB)
3 CONTINUE
C
ENDFILE NOTAPE
REWIND NOTAPE
WRITE(NW,130)
RETURN
C
1 CONTINUE
C PROCESO DE FINALIZACION DEL CALCULO DE INTEGRALES
WRITE(NW,105)
IWAY(10)=1
INDICE=I1-1

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

I=II(INDICE)
J=JJ(INDICE)
K=KK(INDICE)
L=LL(INDICE)
IM NMAX=K
IF(K,EQ,I) INMAX=J
WRITE(1)I,J,K,L,INMAX
ENDFILE 1
REWIND 1
CALL MINTS(9,0)
RETURN
100 FORMAT(40I2)
101 FORMAT(15,3D20,11)
102 FORMAT(10)
103 FORMAT(10A8)
104 FORMAT(1H ,10X,'PROCESO RESTART SCF '/1H ,10X,22(1H*)////1H ,10
*A8////)
105 FORMAT(1H1,'SE FINALIZA EL CALCULO DE LAS INTEGRALES,')
106 FORMAT(////1H ,10X,'NITAPE=',I4/1H ,10X,'NW=',I4//)
107 FORMAT(I3,I2,4D15,8)
108 FORMAT(1H ,10X,'NUMNUC=',I2)
109 FORMAT(1H ,15X,'IZ(',I2,')=',I3)
110 FORMAT(//1H , 'ESCRIBIMOS LAS ',I10,' INTEGRALES H')
111 FORMAT(1H ,10X,'NUMORB=',I4//)
113 FORMAT(//1H , 'ESCRIBIMOS LAS ',I10,' INTEGRALES T')
114 FORMAT(//1H , 'ESCRIBIMOS LAS ',I10,' INTEGRALES S')
115 FORMAT(//1H , 'ESCRIBIMOS LAS ',D15,8,' INTEGRALES BIELECTRONICAS')
116 FORMAT(8(1H ,D15,8,1X))
117 FORMAT(//1H ,10X,'COORDENADAS NUCLEARES'/1H ,10X,'COORDENADAS X
*,2X,,COORDENADA Y ,2X,,COORDENADA Z ,/1H ,10X,3(15(1H*),2X))
118 FORMAT(1H ,10X,3(D15,8,2X))
120 FORMAT(10)
121 FORMAT(15D15,8)
122 FORMAT(//1H , 'DATOS DE LOS ORBITALES DE LA BASE, RESTART')
123 FORMAT(1H ,8X,I2,7X,I4,4X,4(D15,8,7X))
124 FORMAT(1H , 'DATOS DE LOS NUCLEOS, RESTART')
125 FORMAT(//1H , 'ESCRIBIMOS LAS ',I10,' INTEGRALES V')
126 FORMAT(//1H , 'ESCRIBIMOS LAS ',I10,' INTEGRALES H')
127 FORMAT(D15,8)
128 FORMAT(1H ,5X,'SE ESCRIBEN SOBRE 9 LAS INTEGRALES BIELECTRONICAS
*DESDE ',I5,' HASTA ',I5 , '*')
129 FORMAT( 1H ,5X,'NUCLEO',7X,'TIPO',7X,'COORDENADA X',10X,'COORDENAD
*DA Y',10X,'COORDENADA Z',10X,'EXPONENTE'/1H ,5X,6(1H*),7X,4(1H*),
*2X,4(20(1H*),2X))
130 FORMAT(1H1)
131 FORMAT(6(I3,I3,I3,I3,D15,8))
END
C ELEMENT JNVS1202
SUBROUTINE FFORMC
C CALCULO DE LA MATRIZ DE FOCK PARA CAPAS CERRADAS
C
C SE PROGRAMA LA FORMULA:
C  $FC = H + 0,5GC$ 
C DONDE EL FACTOR 0,5 QUE MULTIPLICA A G PROVIENE DE LA PARTICULAR
C MANERA QUE HEMOS SEGUIDO PARA EL CALCULO DE G
C
C DATOS DE ENTRADA:
C -----
C T: MATRIZ H MONOELECTRONICA COMMON C19
C C: MATRIZ DE LA PARTE BIELECTRONICA COMMON C8
C R: MATRIZ DE DENSIDAD COMMON C13
C

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C   DATOS DE SALIDA
C   -----
C   C:MATRIZ DE FOCK                                COMMON C8
C
C   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C   COMMON NUMORB, NR, NW, NT
C   COMMON/C8/C
C   COMMON/C10/H(30,30), A(465)
C   COMMON/C13/R(30,30)
C   COMMON/C19/T
C   COMMON/C20/II(500), JJ(500), X(500)
C   DIMENSION C(30,30), T(465)
C
C   LA MATRIZ H ESTA EN EL COMMON C10 DESDE LA SUBROUTINA ENERGY
C   C:..., CALCULAMOS LA MATRIZ G-LA GUARDAMOS DENTRO DE C-
C
C   CALL CGFORM
C   *** ESCRIBIMOS G EN EL PERIFERICO 11
C   NP=11
C   IVEC=0
C   CALL DWRMAT(NP, C, IVEC)
C
C   CALCULO DE F (LA GUARDAMOS EN C)
C
C   DO 8 I=1, NUMORB
C   DO 7 J=1, NUMORB
C   7 C(I, J)=H(I, J)+C(I, J)
C   8 CONTINUE
C   WRITE(NW, 102)
C   CALL OUTPUT(NUMORB, C, NW)
C   RETURN
C   100 FORMAT(1H ,10X, 'MATRIZ H:')
C   101 FORMAT(1H ,10X, 'MATRIZ G:')
C   102 FORMAT(1H ,10X, 'MATRIZ F:')
C   END
C   ELEMENT JNVS1201
C   SUBROUTINE CGFORM
C
C   CALCULO DE LA MATRIZ G PARA EL CASO DE CAPAS CERRADAS, METODO RHF
C
C   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C   COMMON NUMORB, NR, NW
C   COMMON/C8/G
C   COMMON/C13/R
C   COMMON/C20/II(500), JJ(500), X(500)
C   DIMENSION KK(500), LL(500)
C   DIMENSION G(30,30), R(30,30)
C   INICIALIZAMOS A CERO LA MATRIZ G
C   DO 1 I=1, NUMORB
C   DO 2 J=1, I
C   2 G(I, J)=0, DO
C   1 CONTINUE
C   LEEMOS EL NUMERO DE INTEGRALES A PROCESAR (RNINTS)
C   READ(9, 3002) RNINTS
C
C   LEEMOS LOS BLOQUES DE 500 (INDICES-INTEGRALES)
C   .....
C   NV=RNINTS/500,
C   N2=0
C   IVEC=0
C   RITOT=0,

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

4000 CONTINUE

N1=1

IF((NV,EQ,0),OR,(NV,EQ,IVEC))GO TO 2000

N2=500

GO TO 3000

2000 CONTINUE

REF=FLOAT(IVEC)*500.

N2=RNINTS-REF

3000 READ(9,3001)((II(M),JJ(M),KK(M),LL(M),X(M)),M=N1,N2)

IVEC=IVEC+1

C
C INICIALIZAMOS EL CONTADOR DE INTEGRALES DENTRO DEL BLOQUE(IND)

IND=0

C INICIALIZAMOS EL CONTADOR TOTAL

3 CONTINUE

IND=IND+1

RITOT=RITOT+1.

C *****

TEG=X(IND)

C I1I2=IJ(IND)

C I3I4=IKL(IND)

C CALL UNPACK(I1I2,I3I4,I1,I2,I3,I4)

I1=I1(IND)

I2=JJ(IND)

I3=KK(IND)

I4=LL(IND)

C *****

IF(I2=I1) 45,5,45

5 IF(I3=I1) 25,6,25

6 IF(I4=I1) 20,10,20

C
C INTEGRALES (AA,AA)10 G(I1,I1)=G(I1,I1)+R(I1,I1)*TEG
GO TO 120C
C INTEGRALES (AA,AB)20 G(I1,I1)=G(I1,I1)+2*R(I1,I4)*TEG
G(I1,I4)=G(I1,I4)+R(I1,I1)*TEG
GO TO 120

25 IF(I4=I3) 40,30,40

C
C INTEGRALES (AA,BB)30 G(I1,I1)=G(I1,I1)+2*R(I3,I3)*TEG
G(I1,I3)=G(I1,I3)-R(I1,I3)*TEG
G(I3,I3)=G(I3,I3)+2*R(I1,I1)*TEG
GO TO 120C
C INTEGRALES (AA,BC)40 G(I1,I1)=G(I1,I1)+4*R(I3,I4)*TEG
G(I1,I3)=G(I1,I3)-R(I1,I4)*TEG
G(I1,I4)=G(I1,I4)-R(I1,I3)*TEG
G(I3,I4)=G(I3,I4)+2*R(I1,I1)*TEG
GO TO 120

45 IF(I3=I1) 65,46,65

46 IF(I4=I2) 60,50,60

C
C INTEGRALES (BA,BA)

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

50 G(I1,I1)=G(I1,I1)-R(I2,I2)*TEG
   G(I1,I2)=G(I1,I2)+3*R(I1,I2)*TEG
   G(I2,I2)=G(I2,I2)-R(I1,I1)*TEG
   GO TO 120

```

```

C
C   INTEGRALES (BA,BC)
C

```

```

60 G(I1,I1)=G(I1,I1)-2*R(I2,I4)*TEG
   G(I1,I2)=G(I1,I2)+3*R(I1,I4)*TEG
   G(I1,I4)=G(I1,I4)+3*R(I1,I2)*TEG
   G(I2,I4)=G(I2,I4)-R(I1,I1)*TEG
   GO TO 120

```

```

65 IF(I3-I2) 85,66,85
66 IF(I4-I2) 80,70,80

```

```

C
C   INTEGRALES (BA,AA)
C

```

```

70 G(I1,I2)=G(I1,I2)+R(I2,I2)*TEG
   G(I2,I2)=G(I2,I2)+2*R(I1,I2)*TEG
   GO TO 120

```

```

C
C   INTEGRALES (BA,AC)
C

```

```

80 G(I1,I2)=G(I1,I2)+3*R(I2,I4)*TEG
   G(I1,I4)=G(I1,I4)-R(I2,I2)*TEG
   G(I2,I2)=G(I2,I2)-2*R(I1,I4)*TEG
   G(I2,I4)=G(I2,I4)+3*R(I1,I2)*TEG
   GO TO 120

```

```

85 IF(I4-I2) 95,90,95

```

```

C
C   INTEGRALES (AB,CB)
C

```

```

90 G(I1,I2)=G(I1,I2)+3*R(I2,I3)*TEG
   G(I1,I3)=G(I1,I3)-R(I2,I2)*TEG
   G(I2,I2)=G(I2,I2)-2*R(I1,I3)*TEG
   G(I3,I2)=G(I3,I2)+3*R(I1,I2)*TEG
   GO TO 120

```

```

95 IF(I4-I3) 110,100,110

```

```

C
C   INTEGRALES (AB,CC)
C

```

```

100 G(I1,I2)=G(I1,I2)+2*R(I3,I3)*TEG
     G(I1,I3)=G(I1,I3)-R(I2,I3)*TEG
     G(I3,I3)=G(I3,I3)+4*R(I1,I2)*TEG
     IF(I2-I3) 105,105,106

```

```

C
C   SI B>C
105 G(I3,I2)=G(I3,I2)-R(I3,I1)*TEG
     GO TO 120

```

```

C
C   SI B<C
106 G(I2,I3)=G(I2,I3)-R(I1,I3)*TEG
     GO TO 120

```

```

C
C   INTEGRALES (AB,CD)
C

```

```

110 G(I1,I2)=G(I1,I2)+4*R(I3,I4)*TEG
     G(I1,I3)=G(I1,I3)-R(I2,I4)*TEG
     G(I1,I4)=G(I1,I4)-R(I2,I3)*TEG
     G(I3,I4)=G(I3,I4)+4*R(I1,I2)*TEG
     IF(I2-I3) 115,115,116

```

```

115 G(I3,I2)=G(I3,I2)-R(I4,I1)*TEG
     GO TO 117

```

```

116 G(I2,I3)=G(I2,I3)-R(I1,I4)*TEG

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

117 IF(I2=I4) 118,118,119
118 G(I4,I2)=G(I4,I2)-R(I3,I1)*TEG
      GO TO 120
119 G(I2,I4)=G(I2,I4)-R(I1,I3)*TEG
120 CONTINUE
C   PREGUNTAMOS SI HEMOS PROCESADO TODAS LAS INTEGRALES
      IF(RITOT,EQ,RNINTS)GO TO 7000
C   PREGUNTAMOS SI HEMOS PROCESADO LAS 500 INTEGRALES
      IF(IND,NE,500)GO TO 130
C   .....
      IND=0
      GO TO 4000
C   .....
130 CONTINUE
      GO TO 3
7000 CONTINUE
C
C   LLENADO DEL TRIANGULO SUPERIOR DE LA MATRIZ G
C
      DO 1000 I=1,NUMORB
      DO 1001 J=1,I
      G(I,J)=0,5*G(I,J)
1001  G(J,I)=G(I,J)
1000  CONTINUE
C
C   PUESTA A PUNTO DEL DISCO PARA VOLVER A LEER LAS INTEGRALES DE
C   REPULSION BIELECTRONICA
      REWIND 9
      RETURN
3001  FORMAT(6(I3,I3,I3,I3,D15,8))
3002  FORMAT(D15,8)
      END
C   ELEMENT JNVS1103
      SUBROUTINE RMAT(NPE,NUMORB)
C
C   CALCULO DE LA MATRIZ DE DENSIDAD PARA CAPAS CERRADAS
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON/C8/C
      COMMON/C13/R
      DIMENSION C(30,30),R(30,30)
      DO 1 I=1,NUMORB
      DO 2 J=1,I
      R(I,J)=0,DO
      DO 3 K=1,NPE
      CIK=C(I,K)
      CJK=C(J,K)
      R(I,J)=R(I,J)+2,*CIK*CJK
3     CONTINUE
      R(J,I)=R(I,J)
2     CONTINUE
1     CONTINUE
      RETURN
      END
C   ELEMENT JNVS1102
      SUBROUTINE ENERGY(E,ITE)
C
C   CALCULO DE LA ENERGIA ELECTRONICA PARA UN SISTEMA DE CAPAS CERRA-
C   DAS,METODO RHF,
C
C   SE HA PROGRAMADO LA FORMULA:
      E=TRAZA(H*R)+0,5*TRAZA(G*R)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C
C
C   LOS DATOS DE ENTRADA SON:
C   -----
C   H;MATRIZ DE LA PARTE MONOELECTRONICA DEL OP. DE FOCK      COMMON C19
C   G;MATRIZ DE LA PARTE BIELECTRONICA                       PER. 11
C   R;MATRIZ DE DENSIDAD                                       COMMON C13
C
C   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C   COMMON NUMORB,NR,NW,NT
C   COMMON/C7/G(30,30),GG(30)
C   COMMON/C10/H,A(465)
C   COMMON/C13/R
C   COMMON/C19/T
C   DIMENSION R(30,30),H(30,30),T(465)
C
C   E=0
C   LI=1
C   CALL COPY(H,T,NUMORB,LI)
C   CALL TRAZA(R,H,TR,NUMORB)
C   E1=TR
C   E=E+E1
C   IF(ITE,E0,0)GO TO 1
C
C   LEEMOS G(SE GUARDA EN A)
C   NP=11
C   IVEC=1
C   CALL DWRMAT(NP,G,IVEC)
C   CALL TRAZA(R,G,TR,NUMORB)
C   E2=0,5*TR
C   E=E+E2
C   WRITE(NW,103)ITE,E
C   WRITE(NW,100)E1
C   WRITE(NW,102)E2
C   RETURN
C   1 CONTINUE
C   WRITE(NW,101)E1
C   RETURN
C   100 FORMAT(1H ,15X,'ENERGIA MONOELECTRONICA =' ,D15,8,' A,U,')
C   101 FORMAT(1H ,10X,'ENERGIA INICIAL =' ,D15,8,' A,U,')
C   102 FORMAT(1H ,15X,'ENERGIA BIELECTRONICA =' ,D15,8,' A,U,')
C   103 FORMAT(1H ,10X,'CICLO ',I3,' ... ENERGIA ELECTRONICA =' ,D15,8,' A,U,')
C   *,')
C   END
C   ELEMENT JNVS,104
C   SUBROUTINE PRINTC(VNN,ITE,E)
C
C   SUBROUTINA PARA ESCRIBIR LOS RESULTADOS FINALES DE LA AUTOCON-
C   SISTENCIA PARA CAPAS CERRADAS.
C   *****
C   *
C   * SE HAN PROGRAMADO LAS SIGUIENTES FORMULAS PARA EL CALCULO DE
C   * LA ENERGIA EN SUS DIVERSOS COMPONENTES:
C   *
C   *  $E = \text{TRAZA}(H * R) + 1/4 * \text{TRAZA}(G * R) =$ 
C   *   ENERGIA MONOELECTRONICA + ENERGIA BIELECTRONICA.
C   *
C   *  $= \text{TRAZA}(T * R) + \text{TRAZA}(V * R) + 1/2 * \text{TRAZA}(G * R)$ 
C   *   ENERGIA CINETICA MONOELECTRONICA, EN, POTENCIAL MONOELEC, +
C   *   + ENERGIA POTENCIAL BIELECTRONICA.
C   *
C   *****

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON NUMORB,NR,NW,NT
      COMMON/C2/ANOC(30),NPE
      COMMON/C7/T(465),A(465)
      COMMON/C8/C(30,30)
      COMMON/C13/R(30,30)
      DIMENSION H(30,30),D(30,30)

C      WRITE(NW,100)
C      ESCRIBIMOS EL NUMERO DE ITERACIONES
      WRITE(NW,101)ITE
C      ESCRIBIMOS LOS VALORES Y VECTORES PROPIOS
      CALL RESUL(2)
C      ESCRIBIMOS LA MATRIZ DE DENSIDAD TOTAL
      WRITE(NW,102)
      CALL OUTPUT(NUMORB,R,NW)
C      CALCULO DE LA ENERGIA ELECTRONICA FINAL, DE LA TOTAL Y DE SUS COMPONENTES
C      CINETICA Y POTENCIAL
C      *** ESCRIBIMOS LA ENERGIA ELECTRONICA(SIN REPI, INT.)
      WRITE(NW,107)
      WRITE(NW,103)E
      WRITE(NW,105)VNN
C      *** ENERGIA CINETICA MONOELECTRONICA
      LI=1
C      LECTURA DE T
      NP=8
      READ(NP,121)NINTT
      READ(NP,120)(T(I),I=1,NT)
      REWIND NP
      LI=1
      CALL COPY(D,T,NUMORB,LI)
      CALL TRAZA(R,D,ECIN,NUMORB)
C      *** CALCULO DE LA ENERGIA TOTAL
      ET=E+VNN
      WRITE(NW,109)ET
C      COMPROBAMOS QUE SE CUMPLE EL TEOREMA DEL VIRIAL, DIVIDIENDO LA
C      ENERGIA CINETICA POR LA POTENCIAL
C      ENERGIA CINETICA TOTAL
C      ENERGIA POTENCIAL TOTAL
      EPOT=ET-ECIN
C      FACTOR DEL VIRIAL
      F=ECIN/EPOT
      WRITE(NW,108)ECIN,EPOT,F
      RETURN
100  FORMAT(1H1,120(1H*)/1H ,10X,'RESULTADOS FINALES DE LA AUTOCONSISTEN
      *NCIA DE UN SISTEMA CAPAS CERRADAS SINGLETE'/1H ,120(1H*)//)
101  FORMAT(1H ,10X,'SE HAN EFECTUADO ',I4,' ITERACIONES'////)
102  FORMAT(////1H ,10X,'MATRIZ DE DENSIDAD TOTAL POR BLOQUES'/1H ,120J
      *(1H-)//)
103  FORMAT(1H ,10X,'ENERGIA ELECTRONICA SIN REPULSION NUCLEAR =' ,D15,8J
      *,' A, U,')
105  FORMAT(1H ,10X,'ENERGIA DE REPULSION INTERNUCLEAR=' ,D15,8,' A.U.(')J
107  FORMAT(////1H ,10X,'VALORES DE LA ENERGIA'/1H ,120(1H-)//)
108  FORMAT(1H ,10X,'ENERGIA CINETICA TOTAL=' ,D15,8,' A, U, '/1H ,10X,'EJ
      *NERGIA POTENCIAL TOTAL =' ,D15,8,' A.U, '/1H ,10X,'FACTOR DEL VIRIALJ
      *=' ,D22,11/)
109  FORMAT(1H ,10X,'** ENERGIA TOTAL =' ,D15,8,' A.U, '/')
120  FORMAT(15D15,8)
121  FORMAT(I10)
      END
C      ELEMENT JNVS1003

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

SUBROUTINE CRITER(NU,ITE)

C
C COMPROBACION DE SI SE HA LLEGADO A LA AUTOCONSISTENCIA PARA EL
C CRITERIO QUE HAYAMOS ESTABLECIDO DE ACUERDO CON EL PARAMETRO NNN.
C NNN=1 CONVERGENCIA SOBRE LA ENERGIA ELECTRONICA TOTAL
C SE COMPARA LA ENERGIA ELECT. TOTAL DEL CICLO ANTERIOR
C NNN=2 CONVERGENCIA SOBRE LAS ENERGIAS ORBITALES
C COMPARAMOS LAS ENERGIAS ORBITALES DEL CICLO ANTERIOR
C NNN=3 CONVERGENCIA SOBRE LA MATRIZ DE DENSIDAD
C COMPARAMOS LOS ELEMENTOS DE LA MATRIZ DE DENSIDAD

C LA COMPARACION EN CADA CASO ES DE TAL FORMA QUE SI UN ELEMANTO
C CUALQUIERA NO CONVERGE, LA ITERACION NO HA CONVERGIDO
C

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW
COMMON/ACELE/IACEL
COMMON/C2/ANOC(30),NPE
COMMON/C3/EPS,EPSENT,EPSEND,EPSCOE
COMMON/C5/NNN1,NNN,NNN2,NNN3,NNN4,NNN5
COMMON/C12/END,E
COMMON/C13/R
DIMENSION ENO(30),Q(30,30),NOC(30),R(30,30)

C
C CRITERIOS DE FINALIZACION
C

GO TO (14,16,25),NNN

C*
C CONDICION DE CONVERGENCIA DE LA ENERGIA

14 IF(ITE,EQ,1) GO TO 15
IF(DABS(ET-E),LE,EPSENT) GO TO 35
15 ET=E
GO TO 33

C*
C CONDICION DE CONVERGENCIA DE LAS ENERGIAS ORBITALES

16 IF(ITE,EQ,1) GO TO 18
DO 17 J=1,NUMORB
IF(DABS(ENO(J)-ANOC(J)),GT,EPSEND)GO TO 18
17 CONTINUE
GO TO 35
18 DO 19 J=1,NUMORB
19 ENO(J)=ANOC(J)
GO TO 33

C*
C CONDICION DE CONVERGENCIA DE LA MATRIZ DENSIDAD

25 CONTINUE
IF(ITE,EQ,1)GO TO 23
C LEEMOS LA R DEL CICLO ITERATIVO ANTERIOR-SE GUARDA EN Q-
DO 26 I=1,NUMORB
26 READ(23)(Q(I,J),J=1,NUMORB)
REWIND 23
DO 20 J=1,NUMORB
DO 22 I=1,NUMORB
IF(DABS(Q(I,J)-R(I,J)),GT,EPSCOE) GO TO 23

22 CONTINUE
20 CONTINUE
GO TO 35
23 CONTINUE
DO 8 I=1,NUMORB
8 WRITE(23)(R(I,J),J=1,NUMORB)
ENDFILE 23
REWIND 23

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

33 CONTINUE
 NU=1

C ACCELERACION DE LA CONVERGENCIA POR MEDIO DE UNA REDEFINICION DE
 C LA MATRIZ R
 C IF(IACEL,EQ,0)GO TO 5

C SOLO USAMOS ESTE PROCESO CUANDO EL NUMERO DE ITERACIONES ES MENOR
 C QUE 10
 C

IF(ITE,GT,10)GO TO 5
 CALL ACEL (ITE)

5 CONTINUE
 RETURN

35 NU=0
 GO TO (1,2,3),NNN

1 WRITE(NW,100)

GO TO 4

2 WRITE(NW,101)

GO TO 4

3 WRITE(NW,102)

4 CONTINUE

RETURN

100 FORMAT(1H1,60(1H*)/1H ,10X,'HA CONVERGIDO LA ENERGIA ELECTRONICA
 TOTAL'/1H ,60(1H)/)

101 FORMAT(1H1,60(1H*)/1H ,10X,'HAN CONVERGIDO LAS ENERGIAS ORBITALES'
 /1H ,60(1H)/)

102 FORMAT(1H1,60(1H*)/1H ,10X,'HA CONVERGIDO LA MATRIZ DE DENSIDAD',
 1H ,60(1H)/)

END

C ELEMENT JNVS1004
 SUBROUTINE RESUL(IR)

C ESCRIBIMOS LAS ENERGIAS ORBITALES Y LA MATRIZ DE COEFICIENTESC,

C EL VALOR DEL PARAMETRO IE NOS DEFINE LO QUE VAMOS A ESCRIBIR
 C IE=1 NO SE ESCRIBE NADA

C IE=2 ESCRIBIMOS LAS ENERGIAS ORBITALES

C IE=3 ESCRIBIMOS LAS ENERGIAS ORBITALES Y LA MATRIZ DE COEFI-
 C CIENTES DE LOS VECTORES PROPIOS

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)

COMMON NUMORB,NR,NW

COMMON/C2/B,NPE

COMMON/C8/C

DIMENSION B(30),C(30,30)

C*

IE=IR+1

GO TO(3,1,1),IE

1 CONTINUE

WRITE(NW,20)

WRITE(NW,50)(I,I=1,NUMORB)

WRITE(NW,30)(B(I),I=1,NUMORB)

GO TO(3,3,2),IE

2 WRITE(NW,40)

CALL OUTPUT(NUMORB,C,NW)

3 RETURN

20 FORMAT(1H //11X,'ENERGIAS ORBITALES',/)

30 FORMAT(1H ,3X,D15,8,2X,D15,8,2X,D15,8,2X,D15,8,2X,D15,8,2X
 *,D15,8,2X,D15,8)

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

40 FORMAT(/11X,'MATRIZ C DE COEFICIENTES'/1H ,120(1H-)/)
50 FORMAT(1H , 'MO=' ,5X ,12,16X ,12,16X ,12,16X ,12,16X ,12,16X ,12,16X ,12)
END
C: ELEMENT JNVS1001
SUBROUTINE ACEL(ITE)
C:
C: ACELERACION DE LA CONVERGENCIA POR EL METODO DE OBLIGAR A QUE LAS
C: MATRICES DE DENSIDAD EN LAS PRIMERAS ITERACIONES SEAN PARECIDAS
C: ENTRE SI A LA INICIAL(DE ESTA MANERA SE EVITAN OSCILACIONES),
C:
C: SE HA ELEGIDO EL SIGUIENTE CRITERIO:
C: SI ITE=1,2,3--- RR=0,8*Q+0,2*R
C: SI ITE=4,5,6,7,8,9,10---RR=0,6*Q+0,4*R
C*

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/C13/R
COMMON/C8/Q
DIMENSION R(30,30),Q(30,30)
C:
C: GO TO (1,1,1,2,2,2,2,2,2,2),ITE
C: ACELERACION INICIAL(FUERTE)DE R
1 CONTINUE
DO 10 I=1,NUMORB
DO 20 J=1,NUMORB
R(I,J)=0,2*R(I,J)
20 Q(I,J)=0,8*Q(I,J)
10 CONTINUE
GO TO 3
C: ACELERACION FINAL DE R
2 CONTINUE
DO 30 I=1,NUMORB
DO 40 J=1,NUMORB
R(I,J)=0,4*R(I,J)
40 Q(I,J)=0,6*Q(I,J)
30 CONTINUE
C: OBTENCION DE LA NUEVA MATRIZ
3 CONTINUE
DO 50 I=1,NUMORB
DO 60 J=1,NUMORB
60 R(I,J)=Q(I,J)+R(I,J)
50 CONTINUE
RETURN
END
C: ELEMENT JNVS1002
SUBROUTINE CDIAG
C:
C: CALCULO DE LOS VALORES PROPIOS Y DE LOS VECTORES PROPIOS DEL
C: SISTEMA DE ECUACIONES
C: ** FC=SCE
C:
C: DATOS DE ENTRADA:
C: -----
C: C:MATRIZ DE FOCK A DIAGONALIZAR COMMON C8
C: D=MATRIZ S**(-1/2) PER, 18
C:
C: DATOS DE SALIDA:
C: -----
C: C:NUEVA MATRIZ DE VECTORES PROPIOS COMMON C8
C: NOC:VECTOR DE LAS ENERGIAS ORBITALES COMMON C2
C:
C: IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

COMMON NUMORB, NR, NW, NT
COMMON/C2/ANOC(30), NPE
COMMON/C3/EPS, EPSENT, EPSENO, EPSCOE
COMMON/C8/C
COMMON /C10/D, AUX(465)
COMMON/C13/R
DIMENSION R(30,30), C(30,30), D(30,30), NOC(30)
C*
C LEEMOS LA MATRIZ S**(-1/2) -EN D-
IMAT=1
NP=18
CALL DWRMAT(NP, D, IMAT)
C
C CALCULO DE C=S**(-1/2)*F*S**(-1/2)
C
CALL MMULD(D, C, R, NUMORB)
CALL MMULD(R, D, C, NUMORB)
C
C DIAGONALIZACION DE C
C
MV=0
CALL EIGEND(C, R, NUMORB, MV, EPS)
C*
C GUARDAMOS LOS VALORES DE LAS ENERGIAS ORBITALES
DO 2 I=1, NUMORB
2 ANOC(I)=C(I, I)
C
C CALCULO DE C=S**(-1/2)*Y, LA NUEVA MATRIZ DE COEFICIENTES
C
CALL MMULD(D, R, C, NUMORB)
RETURN
END
C ELEMENT JNVS1007
SUBROUTINE STOP2
C SUBROUTINA PARA INTERRUPIR EL PROCESO CON VISTAS A UN RESATRT
C SOBRE LA SUBROUTINA REINI2
C SE ESCRIBEN LOS DATOS QUE POSTERIORMENTE VA A LEER LA CITADA SUBROUTI
C TINA SOBRE EL PERIFERICO NITAPE ,
C
IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
COMMON NUMORB, NR, NW
COMMON/C2/ANOC(30), NPE
COMMON/C3/EPS, EPSENT, EPSENO, EPSCOE
COMMON/C4/TIPO
COMMON/C5/NUMITE, NNN, IR, INR, INC, IW
COMMON/C6/ALFA(2,2), BETA(2,2)
COMMON/C8/C(30,30)
COMMON/C12/END(30), E
COMMON/C13/R(30,30)
COMMON/C19/VECTO(465)
COMMON/C20/IJJ(500), IKL(500), VALINT(500)
DIMENSION TITOL(10)
DATA DOP/, ORHF,/
C
NITAPE=27
C
WRITE(NITAPE, 100) NUMITE, NNN, IR, INC, IW
WRITE(NITAPE, 102) EPS, EPSENT, EPSENO, EPSCOE
WRITE(NITAPE, 101) TIPO
WRITE(NITAPE, 102) VNN
IF(TIPO, EQ, DOP) GO TO 11
NP=18

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

      IMAT=1
      CALL DWRMAT(NP,R,IMAT)
      DO 1 I=1,NUMORB
1     WRITE(NITAPE,102)(R(I,J),J=1,NUMORB)
11    CONTINUE
      NP=19
      CALL DWRMAT(NP,R,IMAT)
      DO 2 J=1,NUMORB
2     WRITE(NITAPE,102)(R(I,J),J=1,NUMORB)
      IF(TIPO,EQ,DOP) GO TO 12
      WRITE(NITAPE,100)NPE
12    CONTINUE
      WRITE(NITAPE,100)NOPSHL
      WRITE(NITAPE,100)NCLO,NOPEN1,NOPEN2
      WRITE(NITAPE,100)NOC1,NOC2
      DO 5 I=1,NOPSHL
5     WRITE(NITAPE,102)(ALFA(I,J),J=1,3)
      DO 6 I=1,NOPSHL
6     WRITE(NITAPE,102)(BETA(I,J),J=1,3)
      WRITE(NW,1000)
      RETURN
100   FORMAT(40I2)
101   FORMAT(10A8)
102   FORMAT(2(250(D15,8)))
120   FORMAT(I10)
121   FORMAT(2(250D15,8))
1000  FORMAT(1H,'FINAL DE LA ESCRITURA EN STOP2'/)
      END
C     ELEMENT S1008
      SUBROUTINE REINI2 (VNN,NUMC,NUMO1,NUMO,NOC1,NOC2)
C     SUBROUTINA PARA REINICIAR EL PROCESO DENTRO DE UN CICLO AUTOCONSISTENTE YA SEA PARA CAPAS CERRADAS O CAPAS ABIERTAS
C
C     LOS DATOS DE ENTRADA SON:
C
C     CCCCCDATOS SCF
C     -NUMERO DE ITERACIONES MAXIMAS,CRITERIO DE CONVERGENCIA,CRITERIO DE ESCRITURA EN CADA CICLO AUTOCONSISTENTE,ESCRITURA DE LOS RESULTADOS INTERMEDIOS (FORMATO 40I2)
C     -PRECISION EN LA CONVERGENCIA DE JACOBI,ENERGIA ELECTRONICA, ENERGIAS ORBITALES,ELEMENTOS DE LA MATRIZ DE DENSIDAD (FORMATO 4(D15,8,5X))
C     -TIPO DE CALCULO A REALIZAR, A ELEGIR ENTRE CRHF Y ORHF (FORMATO A8)
C     -ENERGIA DE REPULSION INTERNUCLEAR (FORMATO D15,8)
C     -SUPERVECTOR S**(-1/2) (FORMATO 4(D15,8,5X))
C     -***SI TIPO =ORHF-->SE LEE EL SUPERVECTOR S**(1/2) (MISMO FORMATO QUE S**(-1/2))
C     CCCCCDATOS CRHF
C     -***SI TIPO=CRHF :
C     *LEEMOS EL NUMERO DE PARES DE ELECTRONES (FORMATO I2)
C     CCCCCDATOS ORHF
C     -SI TIPO=ORHF:
C     *LEEMOS EL NUMERO DE CAPAS ABIERTAS (FORMATO I2)
C     *EL NUMERO DE ORBITALES EN CADA CAPA (FORMATO 2I2)
C     *NOC1,NOC2 (FORMATO 30I2)
C     *LA MATRIZ ALFA(3,3) (FORMATO 3(D15,8,5X))
C     *LA MATRIZ BETA(3,3) (FORMATO 3(D15,8,5X))
C     CCCCCDATOS DE LA ITERACION
C     -NUMERO DE LA ITERACION (FORMATO I2)
C     -ENERGIA ELECTRONICA EN ESA ITERACION (FORMATO D15,8)
C     -ENERGIAS ORBITALES (FORMATO 30D15,8)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C      -VECTORES PROPIOS      (FORMATO 4D20,13 POR COLUMNAS)
C      -MATRIZ DE DENSIDAD TOTAL (FORMATO 4:20,13 POR COLUMNAS)
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,N
COMMON/START/NITAPE
COMMON/C2/ANOC(30),NPE
COMMON/C20/NOC(30)
COMMON/C3/EPS,EPSENT,EPSENO,EPSCOE
COMMON/C4/TIPO
COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
COMMON/C6/ALFA(2,2),BETA(2,2)
COMMON/C8/C(30,30)
COMMON/C13/R(30,30)
COMMON/C19/VECTO(465)
COMMON/C20/I1J(500),IKL(500),H(500)
DIMENSION TITOL(10)
DATA DOP/' ORHF'/

C
      N=(NUMORB*NUMORB+NUMORB)/2

C
      READ(NITAPE,190)(TITOL(I),I=1,10)
      WRITE(NW,200)(TITOL(I),I=1,10)

C
      READ(NITAPE,102)NUMITE,NNN,IR,INC,IW
      READ(NITAPE,102)EPS,EPSENT,EPSENO,EPSCOE
      READ(NITAPE,101)TIPO
      READ(NITAPE,102)VNN
      WRITE(NW,107)TIPO
      READ(NITAPE,100)NUMITE,NNN,IR,INC,IW
      WRITE(NW,109)EPS,EPSENT,EPSENO,EPSCOE
      IMAT=0
      IF(TIPO,E0,DOP)GO TO 11

C
      INTEGRALES S**(1/2)
      DO 3 I=1,NUMORB
3      READ(NITAPE,102)(R(I,J),J=1,NUMORB)
      NP=18
      CALL DWRMAT(NP,R,IMAT)

      11 CONTINUE

C
      INTEGRALES S**(-1/2)
      DO 4 I=1,NUMORB
4      READ(NITAPE,102)(R(I,J),J=1,NUMORB)
      NP=19
      CALL DWRMAT(NP,R,IMAT)
      IF(TIPO,E0,DOP)GO TO 1

C
      NUMERO DE PARES DE ELECTRONES(SOLO PARA CAPAS CERRADAS)
      READ(NITAPE,100)NPE
      WRITE(NW,110)NPE

      1 CONTINUE

C
      DATOS PARA UN PROBLEMA DE CAPAS ABIERTAS(NUMERO DE CAPAS ABIERTAS,
C
      NUMERO DE CAPAS CERRADAS,NUMERO DE ORBITALES EN LA CAPA 1 Y EN LA 2,
C
      NUMEROS DE OCUPACION DE CADA CAPA,NUMEROS DE OCUPACION DE LOS MOS,
C
      MATRIZ ALFA Y BETA)
      READ(NITAPE,100)NOPSHL
      READ(NITAPE,100)NCLO,NOPEN1,NOPEN2
      NUMC=NCLO
      NUMO1=NOPEN1
      NUMO=NOPEN1+NOPEN2
      WRITE(NW,111)NOPSHL,NCLO,NOPEN1,NOPEN2
      READ(NITAPE,100)NOC1,NOC2
      WRITE(NW,104)NOC1,NOC2

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

DO 5 I=1,NOPSHL
5 READ(NITAPE,102)(ALFA(I,J),J=1,3)
DO 6 I=1,NOPSHL
6 READ(NITAPE,102)(BETA(I,J),J=1,3)
C DATOS DE LA ITERACION
  READ(NR,100)ITE
  READ(NR,102)E
  WRITE(NW,113)VNN,ITE,E
C MATRIZ C EN LA ITERACION
  CALL INPUT(NUMORB,C,NR)
  WRITE(NW,114)
  CALL OUTPUT(NUMORB,C,NITAPE)
C MATRIZ DE DENSIDAD TOTAL EN LA ITERACION
  WRITE(NW,115)
  CALL INPUT(NUMORB,R,NR)
  CALL OUTPUT(NUMORB,R,NITAPE)
  RETURN
7 WRITE(NW,117)
STOP
100 FORMAT(40I2)
101 FORMAT(10A8)
102 FORMAT(4(D15,8,5X))
103 FORMAT(30D15,8)
104 FORMAT(1H,10X,'NOC1=',I2,5X,'NOC2=',I2)
105 FORMAT(1H1,120(1H*)/1H,10X,'RE-START PARA EL PROCESO AUTOCONSISTE
*NTE'/1H,120(1H*)//1H,10X,10A8//)
106 FORMAT(1H,10X,'NITAPE=',I2/1H,10X,'NW=',I2/1H,10X,'NUMORB=',I2)
107 FORMAT(1H,10X,' EL TIPO DE CALCULO ES ',A8)
108 FORMAT(1H,5X,'PARAMETROS :'/1H,10X,'NUMITE=',I2/1H,10X,'NNN=',I
*2/1H,10X,'IR=',I2,5X,'INC=',I2,5X,'IW=',I2)
109 FORMAT(1H,5X,'CRITERIOS DE CONVERGENCIA:'/1H,10X,'EPS=',D15,8/1H
* 10X,'EPSENT=',D15,8/1H,10X,'EPSENO=',D15,8/1H,10X,'EPSCOE=',D15
*,8//)
110 FORMAT(1H,10X,'NPE=',I2)
111 FORMAT(1H,10X,'NOPSHL=',I2,5X,'NCLO=',I2,5X,'NOPEN1=',I2,5X,'NOPEJ
*N2=',I2)
113 FORMAT(1H,10X,'VNN=',D15,8/1H,10X,'ITE=',I2,5X,'E=',D15,8/)
114 FORMAT(1H,10X,'MATRIZ C EN LA ITERACION YA INDICADA')
115 FORMAT(1H,10X,'MATRIZ R EN LA ITERACION YA INDICADA')
116 FORMAT(I10)
117 FORMAT(1H1,'ERROR EN REINI2'/1H,10X,'EL NUMERO DE INTEGRALES NO SE COU
*RRESPONDE CON EL CALCULO A PARTIR DEL NUMERO DE ORBITALES')
190 FORMAT(10A1)
200 FORMAT(1H,10A8)
END
SUBROUTINE MS
C PROGRAMA -OPTMO- DE CALCULO DE LA GEOMETRIA DE EQUILIBRIO,SEGUN
C EL ALGORITMO DE DAVIDON TAL COMO LO MODIFICARON MURTAUGH Y SARGENT
C LA PRESENTE VERSION,FUE ESCRITA POR J.W. MCIVER Y A. KOMORNICKI
C Y POSTERIORMENTE ADAPTADA A UN PROGRAMA INICIO
C
C -----
C
C REFERENCIAS:
C J.W.MCIVER JR.,A.KOMORNICKI,CHEM. PHYS, LETTERS,10,303(1971)
C B,A, MURTAUGH,R,W,H, SARGENT,COMPUTER J.,13,185(1970)
C
C
C ES NECESARIO CONOCER PREVIAMENTE
C -NUMERO DE NUCLEOS(NATOMS=NUMNUC)
C -NUMERO DE ORBITALES(NUMORB=N)
C -UNIDADES LOGICAS DE LECTURA(NR=IR) Y ESCRITURA (NW=IW)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

C LOS DATOS DE ENTRADA SON:
 C -NUMERO ATOMICO, COORDENADAS X, Y, Z (UNA TARJETA POR ATOMO)
 C FORMATO: I5, 3D20, 11
 C -TIPO DE ORBITAL, NUMERO DEL NUCLEO, EXPONENTE, FORMATO: 2I5, D20, 11
 C -PARAMETRO IROUTE PARA INDICAR QUE VALORES SE TOMAN PARA
 C LA CONVERGENCIA
 C SI IROUTE=0 SE TOMAN LOS VALORES STANDARD
 C SI IROUTE NO ES IGUAL A CERO SE LEEN LOS NUEVOS VALORES
 C -VALORES DE LOS PARAMETROS PARA LA CONVERGENCIA (IOPT(1)+IOPT(2)
 C), SOLO SI IROUTE#0
 C FORMATO: 3I5

C ELEMENT S1306
 C SUBROUTINE OPEN(VNN)
 C SUBROUTINA PARA EL CALCULO AUTOCONSISTENTE DE LA ENERGIA ELECTRO-
 C NICA DE UNA MOLECULA CUYO ESTADO ELECTRONICO TENGA UNA CAPA CERRADA
 C Y, HASTA DOS CAPAS ABIERTAS, SEGUN UN METODO RESTRICTED H-F,

C SE HA PROGRAMADO EL ALGORITMO DE LOS OPERADORES DE PROYECCION TAL
 C COMO ES CONOCIDO POR CARBO-HIRAO

CC

C C DEFINICIONES:
 C C-----
 C * LLAMAREMOS CAPA A AQUEL CONJUNTO DE ORBITALES MOLECULARES DEGE-
 C NERADOS ENERGETICAMENTE
 C * LLAMAREMOS CAPA CERRADA AL CONJUNTO DE CAPAS TOTALMENTE OCUPADAS
 C (CADA ORBITAL DE LA CAPA ESTA DOBLEMENTE OCUPADO)
 C * LLAMAREMOS CAPA ABIERTA NUMERO 1 A LA PRIMERA CAPA NO TOTALMENTE
 C OCUPADA
 C * LLAMAREMOS CAPA ABIERTA NUMERO 2 A LA SIGUIENTE CAPA NO OCUPADA
 C TOTALMENTE

C EN LA PRESENTE VERSION SE SUPONEN LAS CAPAS ORDENA-
 C DAS COMO CERRADA---ABIERTA 1---ABIERTA 2, NO EXISTENC
 C POSIBILIDADES DE MAS CAPAS

CC

 *
 * SE HA SUPUESTO QUE DENTRO DE CADA CAPA, LOS ORBITALES *
 * TIENEN EL MISMO NUMERO DE OCUPACION, *
 * ENTRE CAPAS, EL NUMERO DE OCUPACION PUEDE SER DIFERENTE *
 *

 C LA ENTRADA DE DATOS PARA ESTE GRUPO DE PROGRAMAS ES!

C **LEEMOS EL NUMERO DE CAPAS ABIERTAS CON EL SIGUIENTE CONVENIO:
 C NOPSHL=0---UNA CAPA CERRADA Y NINGUNA ABIERTA
 C NOPSHL=1---UNA CAPA CERRADA Y UNA CAPA ABIERTA
 C NOPSHL=2---UNA CAPA CERRADA Y DOS CAPAS ABIERTAS
 C SOLO SE CONSIDERAN DOS CAPAS ABIERTA2 COMO MAXIMO,
 C (FORMATO: I2)
 C **LEEMOS EL NUMERO DE ORBITALES MOLECULARES QUE FORMAN CADA CAPA
 C NUMC, NUMD1, NUMD2
 C (FORMATO: 3I2)
 C **LEEMOS LOS NUMEROS DE OCUPACION DE LAS CAPAS ABIERTAS, NOC1, NOC2
 C (FORMATO: 30I2)
 C **SE LEE LA MULTIPLICIDAD (2*S+1) DEL ESTADO ELECTRONICO (FORMATO: I2).

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C  **SE LEEN LAS CONSTANTES QUE NOS DEFINEN EL ESTADO DE LA CAPA
C  ABIERTA -ALFA,BETA-PARA CADA CAPA
C  -SE LEE LA MATRIZ ALFA EN FORMATO 2D10,3,UNA FICHA POR CAPA
C  -LO MISMO PARA LA MATRIZ BETA
C  ** SE LEE IFORM,SI VALE 0, NO SE CALCULA T (EN EL OP. DE ACOPLAMIENTO)
C  E, SI VALE 1 SE CALCULA
C  FORMATO I2
C  ** SE LEE EL PARAMETRO LANDA(FORMATO D15,8)

```

ES NECESARIO CONOCER ADEMAS ESTAS VARIABLES:

```

C  H;MATRIZ DE LA PARTE MONOELECTRONICA DEL OP, DE FOCK      COMMON C19
C  C;MATRIZ DE LOS VALORES PROPIOS DE PARTIDA                COMMON C8
C  NUMITE;NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES                       COMMON C5
C  EPS,EPSENT,EPSENO,EPSCOE ;CRITERIOS DE CONVERGENCIA     COMMON C3

```

ARCHIVOS USADOS EN ESTE GRUPO

NUM.	TIPO	VARIABLE
1	SEC.	PC
2	SEC.	PD1
3	SEC.	A1
4	SEC.	A2
7	SEC.	B1
8	SEC.	T
10	SEC.	B2
11	SEC.	DC
12	SEC.	DO
13	SEC.	
14	SEC.	PV
15	SEC.	FC
16	SEC.	F01
17	SEC.	F02
18	SEC.	S**(-1/2)
19	SEC.	S**(1/2)
21	SEC.	H
26	SEC.	PO2
27		CINTA PARA RESTART

```

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/A/IWAY(10)
COMMON/ACELE/IACEL
COMMON/START/NNRNW
COMMON/C1/DNUCL(10,3),IZ(10),NUMNUC
COMMON/C2/ANOC(30),NPE
COMMON/C20/NOC(30)
COMMON/C3/EPS,EPSENT,EPSENO,EPSCOE
COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
COMMON/C6/ALFA(2,2),BETA(2,2)
COMMON/C7/H(465),T(465)
COMMON/C8/C(30,30)
COMMON/C10/A(30,30),OMI(465)
COMMON/C12/ENO(30),E
COMMON/C13/R(30,30)
COMMON/C17/NOPSHL
COMMON/C19/HH(465)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

COMMON/C20/IIJ(500),IKL(500),VALINT(500)
COMMON/C24/KK(500),LL(500)

C
C
C
C
C
C
C

-IWAY(1):INDICA EL CAMINO DENTRO DE LA PARTE OPEN-RHF
*IWAY(1)=0-->EJECUCION NORMAL
*IWAY(1)=1-->PROCESO RESTART RHF SOBRE LA SUB. REINI2

IREF=IWAY(1)
IREF=IREF+1
GO TO (1000,1001),IREF

C
C
C
C

1001 CALL REINI2(VNN,NUMC,NUMO1,NUMO,NOC1,NOC2)
GO TO 11
1000 CONTINUE

WRITE(NW,110)
CALL STOP2

C
C
C

LEEMOS LOS DATOS NECESARIOS PARA EL CALCULO DE LAS CAPAS ABIERTAS
POR UN METODO RESTRICTED HARTREE-FOCK

CALL INORHF(NUMC,NUMO1,NUMO,NOC1,NOC2)
11 CONTINUE

C

READ(NR,102)IFORM
IFORM=IFORM+1
READ(NR,103)ALANDA
WRITE(NW,104)ALANDA
WRITE(NW,105)IFORM

C
C

COMENZAMOS EL CALCULO ITERATIVO

CC
CC

NU=1
ITE=0

C

1 CONTINUE

C
C
C

..,CALCULO DE LAS MATRICES DE LOS PROYECTORES,DE LAS MATRICES A Y B
Y DE LAS MATRICES DE DENSIDAD
CALL MATAUX(NUMC,NUMO1,NUMO,NOC1,NOC2)

C
C
C
C

..,CALCULO DE LA ENERGIA ELECTRONICA
CALL OENERG(E,ITE,NOC1,NOC2)
IF(IWAY(3),NE,0)GO TO 4
IF(IR,NE,0)CALL RESULT(IR)

4 CONTINUE
.., COMPROBACION DE SI SE HA LLEGADO A LA AUTOCONSISTENCIA
IF(ITE,EQ,0)GO TO 2
CALL CRITER(NU,ITE)

C

2 CONTINUE
IF(NU,EQ,0)GO TO 10

C
C

..,CALCULO DE LA MATRIZ DE FOCK DE LAS CAPAS CERRADAS Y DE CADA
UNA DE LAS ABIERTAS
CALL FFORMO(NOC1,NOC2)

C
C

..,CALCULO DEL OPERADOR DE ACOPLAMIENTO TOTAL
IF(NOPSHL,EQ,0)GO TO 5
NUMT=NUMC+NUMO
CALL RTFORM(NUMT,IFORM,ALANDA)

C
C

..,DIAGONALIZACION DEL OPERADOR DE ACOPLAMIENTO TOTAL
CALL ODIAG
GO TO 6

C

PARA EL CASO NOPSHL=0 SOLO

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C     5 CALL CDIAG
C     6 CONTINUE
      ITE=ITE+1
      IF(ITE=NUMITE)1,1,7
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     7 CONTINUE
      WRITE(NW,101)ITE,E
      RETURN
10    CONTINUE
      WRITE(NW,100)ITE,E
      CALL PRINTO(VNN,E,ITE)
      RETURN
100   FORMAT(1H ,10X,'HA CONVERGIDO EL PROCESO SCF EN ',I3,' ITERACIONES'
*'/1H ,15X,'ENERGIA TOTAL EN ESE MOMENTO =' ,D15,8,' A,U,')
101   FORMAT(1H ,10X,'NO HA CONVERGIDO EL PROCESO SCF EN ',I3,' ITERACIONES'
*'/1H ,15X,'ENERGIA TOTAL EN ESE MOMENTO =' ,D15,8,' A,U,')
102   FORMAT(I2)
103   FORMAT(D15,8)
104   FORMAT(1H1,10X,'VALOR DEL PARAMETRO LANDA=' ,D15,8/)
105   FORMAT(1H ,10X,'IFORM=' ,I2//)
110   FORMAT(1H1,I20(1H*)/1H ,10X,'COMIENZA EL PROCESO SCF PARA CAPAS ABIERTAS RHF'/1H ,I20(1H*)/)
      END
C     ELEMENT JNVS1304.
C     SUBROUTINE MATAUX(NUMC,NUMO1,NUMO,NOC1,NOC2)
C
C     SUBROUTINA PARA CALCULAR LAS MATRICES ASOCIADAS A LOS PROYECTORES
C     Y A PARTIR DE LAS MISMAS,CALCULAR LAS MATRICES DE DENSIDAD PARA
C     CADA CAPA Y LA TOTAL
C
C     LOS DATOS DE FUNCIONAMIENTO SON:
C     -----
C     1-DATOS DE LAS CAPAS
C     NOPSHL:NUMERO DE CAPAS
C     ALFA(I,J):CONSTANTES ALFA DE LAS CAPAS I (I=1,2)
C     BETA(I,J):CONSTANTES BETA DE LAS CAPAS I(I=1,2)
C     2-DATOS DE CADA CAPA
C     NUMC;NUMERO DE ORBITALES EN LAS CAPAS CERRADAS
C     NUMO;NUMERO DE ORBITALES EN LAS CAPAS ABIERTAS
C     NUMO1;NUMERO DE ORBITALES EN LA CAPA ABIERTA 1
C     3-DATOS DE LOS NUMEROS DE OCUPACION DE LAS CAPAS
C     *SE ASUME QUE LOS ORBITALES DE LAS CAPAS CERRADAS ESTAN DOBLE
C     OCUPADOS
C     NOC1;NUMERO DE OCUPACION DE LOS ORBITALES DE LA CAPA ABIERTA 1
C     NOC2;NUMERO DE OCUPACION DE LOS ORBITALES DE LA CAPA ABIERTA 2
C
C     SE USAN LOS ARCHIVOS 1,2,3,4,7,10,11,12,13,14,26
C
C     IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C     COMMON NUMORB,NR,NW,NT
C     COMMON/C5/ NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
C     COMMON/C6/ALFA(2,2),BETA(2,2)
C     COMMON/C7/PT(465),O(465)
C     COMMON/C8/C(30,30)
C     COMMON/C10/A(30,30),OM(465)
C     COMMON/C13/R(30,30)
C     COMMON/C17/NOPSHL

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

IWR=IW
IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 5
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   CALCULO DE LAS MATRICES A Y B PARA CADA CAPA
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C,.,.,***CALCULO DE LAS MATRICES A1 Y B1 ***
    LI=0
    IVEC=0
    ICAPA=1
    CALL ALFBET(ICAPA,NUMC,NUMO,NUMO1)
C,.,., CALCULO DE A1
    NP=3
    IF(IWR,E0,0)GO TO 51
    WRITE(NW,100)
    CALL OUTPUT(NUMORB,A,NW)
51 CONTINUE
    CALL COPY(A,PT,NUMORB,LI)
    CALL DWRVEC(NP,PT,IVEC)
C,.,., CALCULO DE B1
    NP=7
    IF(IWR,E0,0)GO TO 52
    WRITE(NW,102)
    CALL OUTPUT(NUMORB,R,NW)
52 CONTINUE
    CALL COPY(R,OM,NUMORB,LI)
    CALL DWRVEC(NP,OM,IVEC)
    IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 5
C,.,.,***CALCULO DE LAS MATRICES A2 Y B2 ***
    ICAPA=2
    CALL ALFBET(ICAPA,NUMC,NUMO,NUMO1)
C,.,., CALCULAMOS A2
    IF(IWR,E0,0)GO TO 53
    WRITE(NW,101)
    CALL OUTPUT(NUMORB,A,NW)
53 CONTINUE
    NP=4
    CALL COPY(A,PT,NUMORB,LI)
    CALL DWRVEC(NP,PT,IVEC)
C,.,., CALCULO DE B2
    NP=10
    IF(IWR,E0,0)GO TO 54
    WRITE(NW,103)
    CALL OUTPUT(NUMORB,R,NW)
54 CONTINUE
    CALL COPY(R,OM,NUMORB,LI)
    CALL DWRVEC(NP,OM,IVEC)
5 CONTINUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   CALCULO DE LAS MATRICES DE LOS PROYECTORES(PC,PO1,PO2,PV), DE LAS
C   MATRICES DE DENSIDAD (DC,DO), Y DE LA MATRIZ DE DENSIDAD TOTAL (R)
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   ESTE TROZO GESTIONA EL CALCULO QUE SE EFECTUA DENTRO DE LA
C   MATRIZ DENMAT
    IVEC=0
C
C   INICIALIZAMOS A CERO LA MATRIZ DE DENSIDAD TOTAL
    DO 1 I=1,NUMORB
    DO 2 J=1,NUMORB

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

2 R(I,J)=0,DO
1 CONTINUE
C
C
C CAPAS CERRADAS (PC,DC)
C
C,... CALCULAMOS EL PROYECTOR DE LAS CAPAS CERRADAS
C,... CALCULO DE LA MATRIZ DE DENSIDAD DE LAS CAPAS CERRADAS
10 CONTINUE
    N1=1
    N2=NUMC
    NP=1
    ESC=2,
    IF(IWR,EQ,0)GO TO 55
    WRITE(NW,104)
55 CONTINUE
    CALL DENMAT(N1,N2,NP,ESC)
C
C     ESCRIBIMOS DC
    IF(IWR,EQ,0)GO TO 56
    WRITE(NW,108)
    CALL OUTPUT(NUMORB,A,NW)
56 CONTINUE
    NP=11
    CALL DWRVEC(NP,OM,IVEC)
C,...SUMAMOS LA CONTRIBUCION DE DC A R
    DO 11 I=1,NUMORB
    DO 12 J=1,NUMORB
12 R(I,J)=R(I,J)+A(I,J)
11 CONTINUE
C
C
C CAPA ABIERTA NUMERO 1
C
C     IF(NOPSHL,EQ,0)GO TO 40
C,... CALCULAMOS EL PROYECTOR DE LA CAPA ABIERTA 1
C,... CALCULAMOS P201
20 CONTINUE
    N1=NUMC+1
    N2=NUMC+NUMO1
    NP=2
    ESC=NOC1
    IF(IWR,EQ,0)GO TO 57
    WRITE(NW,105)
57 CONTINUE
    CALL DENMAT(N1,N2,NP,ESC)
C,...SUMAMOS LA CONTRIBUCION DE DO1 A R
    DO 13 I=1,NUMORB
    DO 14 J=1,NUMORB
14 R(I,J)=R(I,J)+A(I,J)
13 CONTINUE
C,...CALCULAMOS DO=P201+P202
    DO 3 I=1,NT
    PT(I)=0,DO
3 PT(I)=PT(I)+OM(I)
C
C
C CAPA ABIERTA NUMERO 2
C
C     IF(NOPSHL,EQ,1)GO TO 50
C,... CALCULO DEL PROYECTOR ASOCIADO A LA CAPA ABIERTA 2
C,... CALCULO DE P202
30 CONTINUE

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

N1=NUMC+NUMO1+1
N2=NUMC+NUMO
NP=26
ESC=NOC2
IF(IWR,EQ,0)GO TO 58
WRITE(NW,106)
58 CONTINUE
CALL DENMAT(N1,N2,NP,ESC)
C,...SUMAMOS LA CONTRIBUCION DE DO2 A R
DO 15 I=1,NUMORB
DO 16 J=1,NUMORB
16 R(I,J)=R(I,J)+A(I,J)
15 CONTINUE
C,...CALCULAMOS DO=P2O1+P2O2
DO 4 I=1,NT
4 PT(I)=PT(I)+OM(I)
50 CONTINUE
C ESCRIBIMOS DO
CALL COPY(A,PT,NUMORB,1)
IF(IWR,EQ,0)GO TO 59
WRITE(NW,109)
CALL OUTPUT(NUMORB,A,NW)
59 CONTINUE
NP=12
CALL DWRVEC(NP,PT,IVEC)
C
C
C CAPAS VIRTUALES
C
C,... CALCULO DEL PROYECTOR ASOCIADO A LOS ORBITALES VIRTUALES
N1=NUMC+NUMO+1
N2=NUMORB
IF(N1.GT,N2)GO TO 40
NP=14
IF(IWR,EQ,0)GO TO 60
WRITE(NW,107)
60 CONTINUE
CALL DENMAT(N1,N2,NP,ESC)
C
C AL TERMINAR EL CALCULO EN LA MATRIZ R TENEMOS LA MATRIZ DE DENSIDAD
C TOTAL,
40 CONTINUE
RETURN
100 FORMAT(1H ,30X,'MATRIZ A DE LA CAPA ABIERTA 1'//)
101 FORMAT(1H ,30X,'MATRIZ A DE LA CAPA ABIERTA 2'//)
102 FORMAT(1H ,30X,'MATRIZ B DE LA CAPA ABIERTA 1'//)
103 FORMAT(1H ,30X,'MATRIZ B DE LA CAPA ABIERTA 2'//)
104 FORMAT(1H ,30X,'MATRIZ DEL PROYECTOR DE LAS CAPAS CERRADAS'//)
105 FORMAT(1H ,30X,'MATRIZ DEL PROYECTOR DE LA CAPA ABIERTA 1'//)
106 FORMAT(1H ,30X,'MATRIZ DEL PROYECTOR DE LA CAPA ABIERTA 2'//)
107 FORMAT(1H ,30X,'MATRIZ DEL PROYECTOR DE LAS CAPAS VIRTUALES'//)
108 FORMAT(1H ,30X,'MATRIZ DE DENSIDAD DE LAS CAPAS CERRADAS'//)
109 FORMAT(1H ,30X,'MATRIZ DE DENSIDAD DE LAS CAPAS ABIERTAS'//)
END
C ELEMENT JNVS1302
SUBROUTINE DENMAT(N1,N2,NP,ESC)
C
C CALCULO DE LAS MATRICES DE LOS PROYECTORES Y DE LAS MATRICES DE
C DENSIDAD ASOCIADA A LAS CAPAS CERRADAS Y A LAS ABIERTAS
C SI N1=1,N2=NUMC,ESC=2, CAPAS CERRADAS
C SI N1=NUMC+1,N2=NUMC+NUMO1,ESC=NOC1 CAPA ABIERTA 1
C SI N1=NUMC+NUMO1+1,N2=NUMC+NUMO,ESC=NOC2 CAPA ABIERTA 2

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C
C      EL PROYECTOR DE CADA CAPA SE CALCULA COMO      P=X*X(T)
C
C      LA DENSIDAD DE CADA CAPA SE CALCULA COMO      D=(NUM, OCUP, **X*X(T)
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON NUMORB, NR, NW, NT
      COMMON/C5/N1, N2, N3, N4, N5, IWR
      COMMON/C7/PT(465), BT(465)
      COMMON/C8/C(30,30)
      COMMON/C10/A(30,30), OM(465)
      COMMON/C13/R(30,30)
      DIMENSION X(30)
      DO 4 I=1, NUMORB
      DO 5 J=1, NUMORB
5      A(I, J)=0, DO
4      CONTINUE

C
C...CALCULAMOS LA MATRIZ DEL PROYECTOR
      IF(N2-N1)50,10,10
10     CONTINUE
      I=N1
6      CONTINUE

C
      DO 7 M=1, NUMORB
7      X(M)=C(M, I)
      DO 8 J=1, NUMORB
      DO 9 K=1, NUMORB
9      A(J, K)=A(J, K)+X(J)*X(K)
8      CONTINUE

C
      I=I+1
      IF(I, LE, N2)GO TO 6

C
C      ESCRIBIMOS EL PROYECTOR
      LI=0
      IVEC=0
      CALL COPY(A, OM, NUMORB, LI)
      CALL DWRVEC(NP, OM, IVEC)
      IF(IWR, EQ, 0)GO TO 11
      CALL OUTPUT(NUMORB, A, NW)
11     CONTINUE

C
C...CALCULAMOS LA MATRIZ DE DENSIDAD
      DO 1 I=1, NUMORB
      DO 2 J=1, NUMORB
2      A(I, J)=ESC*A(I, J)
1      CONTINUE
C      OBTENEMOS LA FORMA VECTORIAL DE LA MATRIZ DE DENSIDAD DE CAPA
      CALL COPY(A, OM, NUMORB, LI)
      RETURN
50    WRITE(NW,100)
      STOP
100   FORMAT(1H1,'ERROR EN DENMAT'/1H , 'N1>N2'/1H , 'STOP')
      END

C      ELEMENT JNV51301
      SUBROUTINE ALFBET(ICAPA, NUMC, NUMO, NUMO1)
C      LA MATRIZ A SE GUARDA DENTRO DE A(COMMON C10) Y LA MATRIZ B SE
C      GUARDA DENTRO DE LA B(COMMON C13)
C

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C SUBROUTINA PARA EL CALCULO DE LAS MATRICES A1,A2,B1 Y B2
C
C   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C   COMMON NUMORB,NR,NW,NT
C   COMMON/C6/ALFA(2,2),BETA(2,2)
C   COMMON/C8/C(30,30)
C   COMMON/C10/A(30,30),O(465)
C   COMMON/C13/B(30,30)
C
C   DIMENSION X(30)
C
C   NCAPAS=NUMC+NUMO
C   INICIALIZAMOS A CERO LAS MATRICES A Y B DE LA CAPA
C   DO 10 I=1,NUMORB
C   DO 11 J=1,NUMORB
C   B(I,J)=0,DO
C 11 A(I,J)=0,DO
C 10 CONTINUE
C   COMIENZA EL CALCULO DE A Y B PARA LA CAPA ICAPA, LA SUMA EN I, SE HACE
C   PARA TODOS LOS ORBITALES MOLECULARES DE LA CAPA ABIERTA 1 Y 2,
C   I=NUMC+1
C 12 CONTINUE
C
C   DO 13 J=1,NUMORB
C   X(J)=C(J,I)
C 13 CONTINUE
C   IF(I=NUMO1)20,20,21
C 20 CONTINUE
C   ESCA=ALFA(ICAPA,1)
C   ESCB=BETA(ICAPA,1)
C 21 CONTINUE
C   ESCA=ALFA(ICAPA,2)
C   ESCB=BETA(ICAPA,2)
C
C   DO 14 J=1,NUMORB
C   DO 15 K=1,NUMORB
C   A(J,K)=A(J,K)+2,*ESCA*X(J)*X(K)
C   B(J,K)=B(J,K)+2,*ESCB*X(J)*X(K)
C 15 CONTINUE
C 14 CONTINUE
C
C   I=I+1
C   IF(I,LE,NCAPAS)GO TO 12
C   RETURN
C   END
C   ELEMENT JNVS1305
C   SUBROUTINE OENERG(ET,ITE,NOC1,NOC2)
C
C   SUBROUTINA PARA EL CALCULO DE LA ENERGIA DE LAS MOLECULAS CON
C   ESTADOS ELECTRONICOS CUYA CONFIGURACION TENGA CAPAS ABIERTAS,
C
C   EL ALGORITMO PROGRAMADO HA SIDO:
C
C   ET=ETC+ET01+ET02=0,5*TR(DC*(H+FC))+
C   +0,5*NOC1*TR(PO1*(H+FO1))+
C   +0,5*NOC2*TR(PO2*(H+FO2))
C   CORRESPONDE A LA FORMULA (80) DEL TRABAJO DE R. CABALLO ET AL.,
C   INT, J, QUANTUM CHEM, 8,373(1974)
C
C   EL ALGORITMO SE HA DIVIDIDO EN TRES PARTES ASOCIADAS CON CADA UNA
C   DE LAS CAPAS OCUPADAS
C   SE NECESITAN ESTOS DATOS DE ENTRADA:

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C -----
C PT;MATRIZ H COMO SUPERVECTOR COMMON C19
C FC;MATRIZ DE FOCK DE LAS CAPAS CERRADAS PER, 15
C FO1;MATRIZ DE FOCK DE LA CAPA ABIERTA 1 PER, 16
C FO2;MATRIZ DE FOCK DE LA CAPA ABIERTA 2 PER, 17
C DC;MATRIZ DE DENSIDAD DE LAS CAPAS CERRADAS PER, 11
C DO=DO1+DO2;MATRIZ DE DENSIDAD DE LAS CAPAS ABIERTAS PER, 12
C PO1;PROYECTOR DE LA CAPA ABIERTA 1 PER, 2
C PO2;PROYECTOR DE LA CAPA ABIERTA 2 PER, 26
C
C IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C COMMON NUMORB, NR, NW, NT
C COMMON/CT7/F, FF(30)
C COMMON/C10/A, OM
C COMMON/C17/NOPSHL
C COMMON/C19/PT
C DIMENSION PT(465), A(30,30), H(30,30), F(30,30), OM(465)
C,.. INICIALIZAMOS LAS VARIABLES DE LAS SUBRUTINAS DWRMAT Y DWRVEC
C IMAT=1
C IVEC=1
C,.. INICIALIZAMOS ENERGIA ELECTRONICA
C ET=0, DO
C,.. SI ITE=0, SE CALCULA LA ENERGIA ELECTRONICA INICIAL COMO LA HUCKEL
C DE LAS CAPAS CERRADAS A MANERA DE REFERENCIA
C IF(ITE, NE, 0) GO TO 5
C LI=1
C CALL COPY(H, PT, NUMORB, LI)
C CALL TRAZA(H, F, TR, NUMORB)
C IF(ITE, EQ, 0) GO TO 8
C
C
C*
C INICIALIZAMOS LA MATRIZ F
C 5 CONTINUE
C DO 3 I=1, NUMORB
C DO 4 J=1, NUMORB
C 4 F(I, J)=0, DO
C 3 CONTINUE
C
C,.. CALCULO DE LA ENERGIA ASOCIADA A LAS CAPAS CERRADAS .....
C ETC=0, 5*TR(DC*(H+FC))
C
C TENEMOS H EN PT(COMMON C19)
C LI=1
C CALL COPY(H, PT, NUMORB, LI)
C LEEMOS FC(EN F)
C NP=15
C CALL DWRMAT(NP, F, IMAT)
C
C
C CALCULAMOS F=FC+H(Y LO GUARDAMOS EN F)
C CALL SUM(F, H, NUMORB)
C
C LEEMOS LA MATRIZ DC
C NP=11
C CALL DWRVEC(NP, OM, IVEC)
C CALL COPY(A, OM, NUMORB, LI)
C CALL OUTPUT(NUMORB, A, NW)
C CALL TRAZA(F, A, TR, NUMORB)
C 8 CONTINUE
C ETC=0, 5*TR
C ET=ETC
C IF(ITE, EQ, 0) GO TO 11

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

      IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 20
C,..CALCULAMOS LA ENERGIA ASOCIADA A LA CAPA ABIERTA 1.....
C   ET01=0,5*NOC1*TR(PO1*(H+FO1))
C*
C   LEEMOS FO1(EN F)
      NP=16
      CALL DWRMAT(NP,F,IMAT)
C   LEEMOS PO1
      NP=2
      CALL DWRVEC(NP,OM,IVEC)
      CALL COPY(A,OM,NUMORB,LI)
      CALL OUTPUT(NUMORB,F,NW)
      CALL SUM(F,H,NUMORB)
      CALL TRAZA(F,A,TR,NUMORB)
      ET1=0,5*FLOAT(NOC1)*TR
      ET=ET+ET1
      IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 20
C,..CALCULO DE LA ENERGIA ASOCIADA A LA CAPA ABIERTA 2.....
C   ET02=0,5*NOC2*TR(PO2*(H+FO2))
C
C   LEEMOS FO2(EN F)
      NP=17
      CALL DWRMAT(NP,F,IMAT)
C   LEEMOS PO2
      NP=26
      CALL DWRVEC(NP,OM,IVEC)
      CALL COPY(A,OM,NUMORB,LI)
      CALL SUM(F,H,NUMORB)
      CALL TRAZA(F,A,TR,NUMORB)
      ET2=0,5*FLOAT(NOC2)*TR
      ET=ET+ET2
C
C 20 CONTINUE
C
C,..ESCRITURA DE LA ENERGIA .....
      WRITE(NW,104)ITE,ET
      WRITE(NW,100)ETC
      IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 25
      WRITE(NW,102)ET1
      IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 25
      WRITE(NW,103)ET2
C
C 25 CONTINUE
C***
      RETURN
      11 CONTINUE
      WRITE(NW,101)ET
      RETURN
      100 FORMAT(1H ,10X,'ENERGIA ASOCIADA A LAS CAPAS CERRADAS =' ,D15,8,'
      *A,U,')
      101 FORMAT(1H ,10X,'ENERGIA INICIAL =' ,D15,8,' A,U,')
      102 FORMAT(1H ,10X,'ENERGIA ELECTRONICA ASOCIADA A LA CAPA 1 =' ,D15,8,'
      *A,U,')
      103 FORMAT(1H ,10X,'ENERGIA ASOCIADA A LA CAPA ABIERTA 2 =' ,D15,8,' A,
      *U,')
      104 FORMAT(1H ,5X,'ITERACION ',I3,'... ENERGIA ELECTRONICA TOTAL =' ,D1
      *5,8,' A,U,')
      END
C   ELEMENT JNVS1307
      SUBROUTINE PRINTO(VNN,E,ITE)
C   ESCRITURA DE LOS RESULTADOS FINALES DE LA AUTOCONSISTENCIA DE LAS
C   CAPAS ABIERTAS RHF

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C
C SE CALCULA ASIMISMO EL FACTOR DEL VIRIAL COMO:
C F=ENERGIA CINETICA/ENERGIA POTENCIAL
C
C SE HA PROGRAMADO EL ALGORITMO SIGUIENTE PARA EL CALCULO DEL FACTOR:
C ET=ECIN+EPOT
C
C                     =
C                     -TRAZA(R*T)+
C                     +TRAZA(R*V)+0.5*TRAZA(DC*GC)+TRAZA(PD1*GO1)+
C
C
C                                 +TRAZA(PD2*GO2)
C
C LOS DATOS DE ENTRADA SON:
C -----
C *ITE;NUMERO DE ITERACIONES REALIZADAS
C *ENO;VECTOR DE LOS VALORES PROPIOS
C *C;MATRIZ DE LOS VECTORES PROPIOS
C *R;MATRIZ DE DENSIDAD TOTAL
C *E;ENERGIA ELECTRONICA
C *T;INTEGRALES DE ENERGIA CINETICA
C *VNN;ENERGIA POTENCIAL DE REPULSION INTERNUCLEAR
C
C
C
C *****
C IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C COMMON NUMORB,NR,NW,NDIM
C COMMON/C2/ANOC(30),NPE
C COMMON/C8/C(30,30)
C COMMON/C10/D(30,30),T(465)
C COMMON/C13/R(30,30)
C
C WRITE(NW,100)
C ESCRIBIMOS EL NUMERO DE ITERACIONES
C WRITE(NW,101)ITE
C ESCRIBIMOS LOS VALORES Y VECTORES PROPIOS
C CALL RESULT(2)
C ESCRIBIMOS LA MATRIZ DE DENSIDAD TOTAL
C WRITE(NW,102)
C CALL OUTPUT(NUMORB,R,NW)
C ESCRIBIMOS LOS RESULTADOS FINALES DE LA ENERGIA
C
C WRITE(NW,105)
C ESCRIBIMOS LA ENERGIA ELECTRONICA SIN REPULSION NUCLEAR
C WRITE(NW,103)E
C WRITE(NW,104) VNN
C CALCULO Y ESCRITURA DE LA ENERGIA TOTAL
C ET=E+VNN
C WRITE(NW,109)ET
C
C
C CALCULO DEL FACTOR DEL VIRIAL
C
C ***ENERGIA CINETICA DE LOS ELECTRONES
C
C LECTURA DE T
C NP=8
C READ(NP,1001)N;NTST
C READ(NP,1000)(T(I),I=1,NDIM)
C REWIND NP
C OBTENCION DE LA FORMA MATRICIAL DE T(EN D)
C LI=1
C CALL COPY(D,T,NUMORB,LI)
C CALCULO DE LA ENERGIA CINETICA DE LOS ELECTRONES
C CALL TRAZA(D,R,ECIN,NUMORB)
C *** ENERGIA POTENCIAL DE LOS ELECTRONES+NUCLEOS
C

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C      EPOT=ET-ECIN
C      ***CALCULAMOS EL FACTOR DEL VIRIAL
C      F=ECIN/EPOT
C      WRITE(NW,108)ECIN,EPOT,F
C      RETURN
100  FORMAT(1H1,120(1H*)/1H ,10X,'RESULTADOS FINALES DE LA AUTOCONSISTE
      *NCIA DE UN SISTEMA DE CAPAS ABIERTAS'/1H ,120(1H*)//)
101  FORMAT(1H ,10X,'SE HAN EFECTUADO ' ,I4,' ITERACIONES'///// )
102  FORMAT(/////1H ,10X,'MATRIZ DE DENSIDAD TOTAL POR BLOQUES'/1H ,120
      *(1H=)//)
103  FORMAT(1H ,10X,'ENERGIA ELECTRONICA SIN REPULSION NUCLEAR =' ,D15,8
      *,' A. U. ')
104  FORMAT(1H ,10X,'ENERGIA DE REPULSION INTERNUCLEAR=' ,D15,8,' A.U. ')
105  FORMAT(///1H ,5X,'RESULTADOS DE LA ENERGIA')
108  FORMAT(1H ,10X,'ENERGIA CINETICA TOTAL=' ,D15,8,' A. U. '/1H ,10X,'E
      *NERGIA POTENCIAL TOTAL =' ,D15,8,' A.U. '/1H ,10X,'FACTOR DEL VIRIAL
      *=' ,D22,11/)
109  FORMAT(1H , 10X,'** ENERGIA TOTAL =' ,D15,8,' A.U. '/')
1000 FORMAT(15D15,8)
1001 FORMAT(I10)
      END
C      ELEMENT JNVS1402
C      SUBROUTINE OGFORM(NOC1,NOC2)
C
C      SUBROUTINA PARA EL CALCULO DE LA MATRIZ G ASOCIADA A LA PARTE BIE-
C      LECTRONICA DE LA MATRIZ DE FOCK
C
C      SE HA PROGRAMADO PENSANDO EN LA POSIBILIDAD DE UNA CAPA CERRADA Y
C      DOS CAPAS ABIERTAS, CON LO CUAL SE EFECTUA OPTATIVAMENTE SEGUN EL
C      PARAMETRO NOPSHL EL CALCULO DE GC, GO1 Y GO2.
C
C      EL ALGORITMO USADO ES UNA EXTENSION DEL DE UNA SOLA CAPA CERRADA
C      CORRESPONDEN A LAS FORMULAS (77) (78) Y (79) DEL TRABAJO DE
C      CABALLOL ET AL.
C
C      EL ALGORITMO ELEGIDO PRESENTA LA RESTICCION DE QUE LAS DOS CAPAS
C      ESTAN COMPUESTAS POR ORBITALES CUYO NUMERO DE OCUPACION ES EL
C      MISMO DENTRO DE CADA CAPA
C
C      UNICAMENTE SE CALCULA EL TRIANGULO INFERIOR DE LA MATRIZ EN CADA
C      CASO A TRAVES DE UN SUPERVECTOR FORMADO POR LOS ELEMENTOS DEL
C      TRIANGULO INFERIOR MAS LA DIAGONAL.
C
C      ESTA SUBROUTINA FUE PROGRAMADA EN MAYO DE 1979 POR J, NOVOA.
C
C      USAMOS LOS PERIFERICOS:
C      3      SEC,      MATRIZ A1
C      4      SEC,      MATRIZ A2
C      7      SEC,      MATRIZ B1
C      9      SEC,      (INDICES-INTEGRALES)
C      10     SEC,      MATRIZ B2
C      11     SEC,      MATRIZ DE DENSIDAD DE LAS CAPAS CERRADAS PC
C      12     SEC,      MATRIZ DE DENSIDAD DE LAS CAPAS ABIERTAS PO
C
C      -----
C      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C      COMMON NUMORB,NR,NW,NT
C      COMMON/C7/GC,GO1
C      COMMON/C10/A(30,30),GO2
C      COMMON/C17/NOPSHL
C      COMMON/C20/II(500),JJ(500),X(500)
C      COMMON/C24/KK(500),LL(500)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

DIMENSION GC(465),GO1(465),GO2(465)
DIMENSION PC(465),A1(465),A2(465),B1(465),B2(465),RT(465)
C *****
C*  NOTA: LAS DIMENSIONES DE IJJ, IKL Y X NO PUEDEN CAMBIAR EN UN
C*  CAMBIO EN LAS DIMENSIONES DE LA BASE,
C  ESTAN AJUSTADAS SUS DIMENSIONES PARA QUE CORRESPONDAN A LAS DE
C  LOS BLOQUE DEL CALCULO DE INTEGRALES
C *****
C
DNOC1=FLOAT(NOC1)/2,
DNOC2=FLOAT(NOC2)/2,
C
C*
C
C
C  INICIALIZAMOS A CERO LOS SUPERVECTORES.
DO 1 I=1,465
GC(I)=0,DO
GO1(I)=0,DO
GO2(I)=0,DO
1 CONTINUE
C
C*
C  INICIALIZAMOS A CERO TODAS LAS MATRICES DE DENSIDAD Y LAS
C  ASOCIADAS A LAS CAPAS.
DO 2 I=1,465
PC(I)=0,DO
A1(I)=0,DO
B1(I)=0,DO
A2(I)=0,DO
B2(I)=0,DO
2 CONTINUE
C
C  LEEMOS LAS MATRICES DE DENSIDAD Y LAS MATRICES A Y B
C  IVEC=1
C....CAPAS CERRADAS
C  LEEMOS PC
NP=11
CALL DWRVEC(NP,PC,IVEC)
CALL COPY(A,PC,NUMORB,1)
IF(NOPSHL,EQ,0)GO TO 8
C....CAPA ABIERTA 1
C  LEEMOS PD
NP=12
CALL DWRVEC(NP,A2,IVEC)
C  CALCULAMOS RT=PC+0,5*PD DE UTILIDAD EN ESTA SUBROUTINA
8 CONTINUE
DO 7 I=1,NT
7  RT(I)=PC(I)+0,5*A2(I)
C
C
C  IF(NOPSHL,EQ,0)GO TO 4
C  LEEMOS A1
NP=3
CALL DWRVEC(NP,A1,IVEC)
C  LEEMOS B1
NP=7
CALL DWRVEC(NP,B1,IVEC)
C....CAPA ABIERTA 2
C  LEEMOS A2
NP=4
CALL DWRVEC(NP,A2,IVEC)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C      LEEMOS B2
C      NP=10
C      CALL DWRVEC(NP,B2,IVEC)
C
C      4 CONTINUE
C
C      LEEMOS EL NUMERO TOTAL DE INTEGRALES (NINTS)
C      READ(9,1000)RNINTS
C
C      LEEMOS LAS INTEGRALES BIELECTRONICAS Y LOS INDICES EN BLOQUES
C      DE 500 ,LOS BLOQUES SE COMPONEN DE UNIDADES REPETITIVAS
C      (INDICES I,J=INDICES J,K=VALOR DE LA INTEGRAL)
C
C      .....
C      RNFORM=500,
C      NFORM=RNFORM
C      RNV=RNINTS/RNFORM
C      NV=RNV
C      N2=0
C      ITIM=0
C      N1=N2+1
C      4000 CONTINUE
C      IF((NV.EQ.0),OR.(NV.EQ.ITIM))GO TO 2000
C      ITIM=ITIM+1
C      N2=NFORM
C      GO TO 3000
C      2000 CONTINUE
C      REF=FLOAT(ITIM)*RNFORM
C      N2=RNINTS-REF
C      3000 READ(9,1001)((I1(M),JJ(M),KK(M),LL(M),X(M)),M=N1,N2)
C      .....
C*
C      COMIENZA EL CALCULO DE GC,GO1 Y GO2
C
C      INICIALIZAMOS EL CONTADOR DE INTEGRALES BIELECTRONICAS CALCULADAS
C      EN CADA BLOQUE (IND) Y EL TOTAL(ITOT)
C
C      IND=0
C      RITOT=0,
C      3 CONTINUE
C      IND=IND+1
C      RITOT=RITOT+1,
C
C      *****
C      TEG=X(IND)
C      I1I2=IJ(IND)
C      I3I4=IKL(IND)
C      CALL UNPACK(I1,I2,I3I4,I1,I2,I3,I4)
C      I1=I1(IND)
C      I2=JJ(IND)
C      I3=KK(IND)
C      I4=LL(IND)
C      *****
C      WRITE(NW,1001)I1,I2,I3,I4,TEG
C
C      CALCULAMOS EL VALOR DEL PUNTERO PARA EL ELEMENTO A(I,J) EN EL
C      SUPERVECTOR
C      A(I1,I1)
C      K=(I1*I1-I1)/2+I1
C      A(I1,I2)
C      L=(I1*I1-I1)/2+I2
C      A(I1,I3)
C      M=(I1*I1-I1)/2+I3

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C A(I1,I4)
C N=(I1*I1-I1)/2+I4
C A(I2,I2)
C K1=(I2*I2-I2)/2+I2
C A(I2,I3)
C L1=(I2*I2-I2)/2+I3
C A(I2,I4)
C M1=(I2*I2-I2)/2+I4
C A(I3,I1)
C N1=(I3*I3-I3)/2+I1
C A(I3,I2)
C K2=(I3*I3-I3)/2+I2
C A(I3,I3)
C L2=(I3*I3-I3)/2+I3
C A(I3,I4)
C M2=(I3*I3-I3)/2+I4
C A(I4,I1)
C N2=(I4*I4-I4)/2+I1
C A(I4,I2)
C K3=(I4*I4-I4)/2+I2

```

C* CLASIFICACION Y CALCULO DE LA INTEGRAL

```

C K=0
C L=0
C M=0
C N=0
C K1=0
C L1=0
C M1=0
C N1=0
C K2=0
C L2=0
C M2=0
C N2=0
C K3=0

```

```

5 IF(I2-I1)45,5,45
6 IF(I3-I1)25,6,25
6 IF(I4-I1)20,10,20

```

C (AA,AA)

10 CONTINUE

```

K=(I1*I1-I1)/2+I1
GC(K )=GC(K )+(RT(K)) *TEG
IF(NOPSHL.EQ.0)GO TO 120
GO1(K )=GO1(K )+( (DNOC1)*PC(K)+2.*A1(K)-B1(K))*TEG
IF(NOPSHL.EQ.1)GO TO 120
GO2(K )=GO2(K )+( (DNOC2)*PC(K)+2.*A2(K)-B2(K))*TEG
GO TO 120

```

C (AA,AB)

20 CONTINUE

```

K=(I1*I1-I1)/2+I1
N=(I1*I1-I1)/2+I4
GC(K )=GC(K )+2.*(RT(N)) *TEG
GC(N )=GC(N )+(RT(K)) *TEG
IF(NOPSHL.EQ.0)GO TO 120
GO1(K )=GO1(K )+( (DNOC1)*2.*PC(N)+4.*A1(N)-B1(N))*TEG
GO1(N )=GO1(N )+( (DNOC1)*PC(K)+2.*A1(K)-B1(K))*TEG
IF(NOPSHL.EQ.1)GO TO 120

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

GO2(K)=GO2(K)+((DNOC2)*2.*PC(N)+4.*A2(N)-B2(N))*TEG
 GO2(N)=GO2(N)+((DNOC2)*PC(K)+2.*A2(K)-B2(K))*TEG

GO TO 120

25 IF(I4-I3)40,30,40

C
C
C

..... (AA,BB)

30 CONTINUE

K=(I1*I1-I1)/2+I1

M=(I1*I1-I1)/2+I3

L2=(I3*I3-I3)/2+I3

GC(K)=GC(K)+2.*(RT(L2)) *TEG

GC(M)=GC(M)-(RT(M)) *TEG

GC(L2)=GC(L2)+2.*(RT(K)) *TEG

IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 120

GO1(K)=GO1(K)+2.*((DNOC1)*PC(L2)+2.*A1(L2))*TEG

GO1(M)=GO1(M)-((DNOC1)*PC(M)+B1(M))*TEG

GO1(L2)=GO1(L2)+2.*((DNOC1)*PC(K)+A1(K))*TEG

IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 120

GO2(K)=GO2(K)+2.*((DNOC2)*PC(L2)+2.*A2(L2))*TEG

GO2(M)=GO2(M)-((DNOC2)*PC(M)+B2(M))*TEG

GO2(L2)=GO2(L2)+2.*((DNOC2)*PC(K)+A2(K))*TEG

GO TO 120

C
C
C

..... (AA,BC)

40 CONTINUE

K=(I1*I1-I1)/2+I1

M=(I1*I1-I1)/2+I3

N=(I1*I1-I1)/2+I4

M2=(I3*I3-I3)/2+I4

GC(M2)=GC(M2)+2.*(RT(K)) *TEG

GC(N)=GC(N)-(RT(M)) *TEG

GC(M)=GC(M)-(RT(N)) *TEG

GC(K)=GC(K)+4.*(RT(M2)) *TEG

IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 120

GO1(K)=GO1(K)+4.*((DNOC1)*PC(M2)+A1(M2))*TEG

GO1(M)=GO1(M)-((DNOC1)*PC(N)+B1(N))*TEG

GO1(N)=GO1(N)-((DNOC1)*PC(M)+B1(M))*TEG

GO1(M2)=GO1(M2)+2.*((DNOC1)*PC(K)+A1(K))*TEG

IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 120

GO2(K)=GO2(K)+4.*((DNOC2)*PC(M2)+A2(M2))*TEG

GO2(M)=GO2(M)-((DNOC2)*PC(N)+B2(N))*TEG

GO2(N)=GO2(N)-((DNOC2)*PC(M)+B2(M))*TEG

GO2(M2)=GO2(M2)+2.*((DNOC2)*PC(K)+A2(K))*TEG

GO TO 120

45 IF(I3-I1)65,46,65

46 IF(I4-I2)60,50,60

C
C
C

..... (BA,BA)

50 CONTINUE

K=(I1*I1-I1)/2+I1

L=(I1*I1-I1)/2+I2

K1=(I2*I2-I2)/2+I2

GC(K)=GC(K)-(RT(K1)) *TEG

GC(L)=GC(L)+3.*(RT(L)) *TEG

GC(K1)=GC(K1)-(RT(K)) *TEG

IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 120

GO1(K)=GO1(K)-((DNOC1)*PC(K1)+B1(K1))*TEG

GO1(L)=GO1(L)+(3.*((DNOC1)*PC(L)+4.*A1(L)-B1(L))*TEG

GO1(K1)=GO1(K1)-((DNOC1)*PC(K)+B1(K))*TEG

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

IF(NOPSHL.EQ,1)GO TO 120
GO2(K )=GO2(K )-(DNOC2)*PC(K1)+B2(K1))*TEG
GO2(L )=GO2(L )+(3.*(DNOC2)*PC(L)+4.*A2(L)-B2(L))*TEG
GO2(K1 )=GO2(K1 )-(DNOC2)*PC(K)+B2(K))*TEG
GO TO 120
    
```

C
C
C (BA,BC)

60 CONTINUE

```

K=(I1*I1-I1)/2+I1
L=(I1*I1-I1)/2+I2
N=(I1*I1-I1)/2+I4
M1=(I2*I2-I2)/2+I4
GC(K )=GC(K )-2.*(RT(M1)) *TEG
GC(L )=GC(L )+3.*(RT(N)) *TEG
GC(N )=GC(N )+3.*(RT(L)) *TEG
GC(M1 )=GC(M1 )-(RT(K)) *TEG
IF(NOPSHL.EQ,0)GO TO 120
GO1(K )=GO1(K )-2.*(DNOC1)*PC(M1)+B1(M1))*TEG
GO1(L )=GO1(L )+(3.*(DNOC1)*PC(N)+4.*A1(N)-B1(N))*TEG
GO1(N )=GO1(N )+(3.*(DNOC1)*PC(L)+4.*A1(L)-B1(L))*TEG
GO1(M1 )=GO1(M1 )-(DNOC1)*PC(K)+B1(K))*TEG
IF(NOPSHL.EQ,1)GO TO 120
GO2(K )=GO2(K )-2.*(DNOC2)*PC(M1)+B2(M1))*TEG
GO2(L )=GO2(L )+(3.*(DNOC2)*PC(N)+4.*A2(N)-B2(N))*TEG
GO2(N )=GO2(N )+(3.*(DNOC2)*PC(L)+4.*A2(L)-B2(L))*TEG
GO2(M1 )=GO2(M1 )-(DNOC2)*PC(K)+B2(K))*TEG
GO TO 120
    
```

```

65 IF(I3-I2)85,66,85
66 IF(I4-I2)80,70,80
    
```

C
C
C (BA,AA)

70 CONTINUE

```

L=(I1*I1-I1)/2+I2
K1=(I2*I2-I2)/2+I2
GC(L )=GC(L )+(RT(K1)) *TEG
GC(K1 )=GC(K1 )+2.*(RT(L)) *TEG
IF(NOPSHL.EQ,0)GO TO 120
GO1(L )=GO1(L )+(DNOC1)*PC(K1)+2.*A1(K1)-B1(K1))*TEG
GO1(K1 )=GO1(K1 )+2.*(DNOC1)*PC(L)+2.*A1(L)-B1(L))*TEG
IF(NOPSHL.EQ,1)GO TO 120
GO2(L )=GO2(L )+(DNOC2)*PC(K1)+2.*A2(K1)-B2(K1))*TEG
GO2(K1 )=GO2(K1 )+2.*(DNOC2)*PC(L)+2.*A2(L)-B2(L))*TEG
GO TO 120
    
```

C
C
C (BA,AC)

80 CONTINUE

```

L=(I1*I1-I1)/2+I2
N=(I1*I1-I1)/2+I4
K1=(I2*I2-I2)/2+I2
M1=(I2*I2-I2)/2+I4
GC(L )=GC(L )+3.*(RT(M1)) *TEG
GC(N )=GC(N )-(RT(K1)) *TEG
GC(K1 )=GC(K1 )-2.*(RT(N)) *TEG
GC(M1 )=GC(M1 )+3.*(RT(L)) *TEG
IF(NOPSHL.EQ,0)GO TO 120
GO1(L )=GO1(L )+(3.*(DNOC1)*PC(M1)+4.*A1(M1)-B1(M1))*TEG
GO1(N )=GO1(N )-(DNOC1)*PC(K1)+B1(K1))*TEG
GO1(K1 )=GO1(K1 )-2.*(DNOC1)*PC(N)+B1(N))*TEG
GO1(M1 )=GO1(M1 )+(3.*(DNOC1)*PC(L)+4.*A1(L)-B1(L))*TEG
    
```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 120
GO2(L )=GO2(L )+(3.*(DNOC2)*PC(M1)+4.*A2(M1)-B2(M1))*TEG
GO2(N )=GO2(N )-(DNOC2)*PC(K1)+B2(K1))*TEG
GO2(K1 )=GO2(K1 )-2.*(DNOC2)*PC(N)+B2(N))*TEG
GO2(M1 )=GO2(M1 )+(3.*(DNOC2)*PC(L)+4.*A2(L)-B2(L))*TEG
GO TO 120

```

C
C
C

```

85 IF(I4-I2)95,90,95
..... (AB,CB) .....

```

```

90 CONTINUE
L=(I1*I1-I1)/2+I2
M=(I1*I1-I1)/2+I3
K1=(I2*I2-I2)/2+I2
L1=(I2*I2-I2)/2+I3
K2=(I3*I3-I3)/2+I2

```

```

GC(L )=GC(L )+3.*(RT(L1)) *TEG
GC(M )=GC(M )-(RT(K1)) *TEG
GC(K1 )=GC(K1 )-2.*(RT(M)) *TEG
GC(K2 )=GC(K2 )+3.*(RT(L)) *TEG

```

```

IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 120
GO1(L )=GO1(L )+(3.*(DNOC1)*PC(L1)+4.*A1(L1)-B1(L1))*TEG
GO1(M )=GO1(M )-(DNOC1)*PC(K1)+B1(K1))*TEG
GO1(K1 )=GO1(K1 )-2.*(DNOC1)*PC(M)+B1(M))*TEG
GO1(K2 )=GO1(K2 )+(3.*(DNOC1)*PC(L)+4.*A1(L)-B1(L))*TEG

```

```

IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 120
GO2(L )=GO2(L )+(3.*(DNOC2)*PC(L1)+4.*A2(L1)-B2(L1))*TEG
GO2(M )=GO2(M )-(DNOC2)*PC(K1)+B2(K1))*TEG
GO2(K1 )=GO2(K1 )-2.*(DNOC2)*PC(M)+B2(M))*TEG
GO2(K2 )=GO2(K2 )+(3.*(DNOC2)*PC(L)+4.*A2(L)-B2(L))*TEG

```

C
C
C

```

95 GO TO 120
IF(I4-I3)110,100,110
..... (AB,CC) .....

```

```

100 CONTINUE
L=(I1*I1-I1)/2+I2
M=(I1*I1-I1)/2+I3
L1=(I2*I2-I2)/2+I3
L2=(I3*I3-I3)/2+I3

```

```

GC(L )=GC(L )+2.*(RT(L2)) *TEG
GC(M )=GC(M )-(RT(L1)) *TEG
GC(L2 )=GC(L2 )+4.*(RT(L)) *TEG

```

```

IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 104
GO1(L )=GO1(L )+2.*(DNOC1)*PC(L2)+A1(L2))*TEG
GO1(M )=GO1(M )-(DNOC1)*PC(L1)+B1(L1))*TEG
GO1(L2 )=GO1(L2 )+4.*(DNOC1)*PC(L)+A1(L))*TEG

```

```

IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 104
GO2(L )=GO2(L )+2.*(DNOC2)*PC(L2)+A2(L2))*TEG
GO2(M )=GO2(M )-(DNOC2)*PC(L1)+B2(L1))*TEG
GO2(L2 )=GO2(L2 )+4.*(DNOC2)*PC(L)+A2(L))*TEG

```

```

104 CONTINUE
IF(I2-I3)105,105,106
..... CASO C>B .....

```

C

```

105 CONTINUE
K2=(I3*I3-I3)/2+I2
N1=(I3*I3-I3)/2+I1
GC(K2 )=GC(K2 )-(RT(N1)) *TEG
IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 120
GO1(K2 )=GO1(K2 )-(DNOC1)*PC(N1)+B1(N1))*TEG
IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 120
GO2(K2 )=GO2(K2 )-(DNOC2)*PC(N1)+B2(N1))*TEG

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

GO TO 120
C ..... CASO C<B .....
106 CONTINUE
GC(L1 )=GC(L1 )-(RT(M)) *TEG
IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 120
GO1(L1 )=GO1(L1 )-( (DNOC1)*PC(M)+B1(M))*TEG
IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 120
GO2(L1 )=GO2(L1 )-( (DNOC2)*PC(M)+B2(M))*TEG
GO TO 120

```

C (AB,CD)

```

110 CONTINUE
L=(I1*I1-I1)/2+I2
M=(I1*I1-I1)/2+I3
N=(I1*I1-I1)/2+I4
L1=(I2*I2-I2)/2+I3
M1=(I2*I2-I2)/2+I4
M2=(I3*I3-I3)/2+I4
GC(L )=GC(L )+4.*(RT(M2)) *TEG
GC(M )=GC(M )-(RT(M1)) *TEG
GC(N )=GC(N )-(RT(L1)) *TEG
GC(M2 )=GC(M2 )+4.*(RT(L)) *TEG
IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 109
GO1(L )=GO1(L )+4.*( (DNOC1)*PC(M2)+A1(M2))*TEG
GO1(M )=GO1(M )-( (DNOC1)*PC(M1)+B1(M1))*TEG
GO1(N )=GO1(N )-( (DNOC1)*PC(L1)+B1(L1))*TEG
GO1(M2 )=GO1(M2 )+4.*( (DNOC1)*PC(L)+A1(L))*TEG
IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 109
GO2(L )=GO2(L )+4.*( (DNOC2)*PC(M2)+A2(M2))*TEG
GO2(M )=GO2(M )-( (DNOC2)*PC(M1)+B2(M1))*TEG
GO2(N )=GO2(N )-( (DNOC2)*PC(L1)+B2(L1))*TEG
GO2(M2 )=GO2(M2 )+4.*( (DNOC2)*PC(L)+A2(L))*TEG

```

```

109 CONTINUE
IF(I2-I3)115,115,116

```

```

C ..... CASO C>B .....
115 CONTINUE
K2=(I3*I3-I3)/2+I2
N2=(I4*I4-I4)/2+I1
GC(K2 )=GC(K2 )-(RT(N2)) *TEG
IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 117
GO1(K2 )=GO1(K2 )-( (DNOC1)*PC(N2)+B1(N2))*TEG
IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 117
GO2(K2 )=GO2(K2 )-( (DNOC2)*PC(N2)+B2(N2))*TEG
GO TO 117

```

```

C ..... CASO C<B .....
116 CONTINUE
L1=(I2*I2-I2)/2+I3
GC(L1 )=GC(L1 )-(RT(N)) *TEG
IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 117
GO1(L1 )=GO1(L1 )-( (DNOC1)*PC(N)+B1(N))*TEG
IF(NOPSHL,E0,1)GO TO 117
GO2(L1 )=GO2(L1 )-( (DNOC2)*PC(N)+B2(N))*TEG

```

```

117 CONTINUE
IF(I2-I4)118,118,119

```

```

C ..... CASO D>B .....
118 CONTINUE
N1=(I3*I3-I3)/2+I1
K3=(I4*I4-I4)/2+I2
GC(K3 )=GC(K3 )-(RT(N1)) *TEG
IF(NOPSHL,E0,0)GO TO 120
GO1(K3 )=GO1(K3 )-( (DNOC1)*PC(N1)+B1(N1))*TEG

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```
IF(NOPSHL,EQ,1)GO TO 120
GO2(K3 )=GO2(K3 )-( (DNOC2)*PC(N1)+B2(N1))*TEG
GO TO 120
```

C CASO D<B
 119 CONTINUE

```
M1=(I2*I2-I2)/2+I4
GC(M1 )=GC(M1 )-(RT(M)) *TEG
IF(NOPSHL,EQ,0)GO TO 120
GO1(M1 )=GO1(M1 )-( (DNOC1)*PC(M)+B1(M))*TEG
IF(NOPSHL,EQ,1)GO TO 120
GO2(M1 )=GO2(M1 )-( (DNOC2)*PC(M)+B2(M))*TEG
```

120 CONTINUE

C* SI HAN SIDO PROCESADAS TODAS LAS 465 INTEGRALES LEEMOS OTRO BLOQUE

C SI YA HEMOS CALCULADO LAS NINTS INTEGRALES SALIMOS DE OGFORM

```
IF(RITOT,EQ,RNINTS)GO TO 7000
```

C SI HEMOS PROCESADO LAS 500 INTEGRALES LEEMOS OTRO BLOQUE

```
IF(IND,NE,500)GO TO 130
```

C
 IND=0
 GO TO 4000

130 CONTINUE

```
GO TO 3
```

7000 CONTINUE

C PUESTA A PUNTO DEL DISCO PARA VOLVER A LEER LAS INTEGRALES DE

C REPULSION BIELECTRONICA

```
REWIND 9
```

```
RETURN
```

```
101 FORMAT(1H ,4(I5,2X))
102 FORMAT( 6(1X,D15,8,1X))
1000 FORMAT(D15,8)
1001 FORMAT(6(I3,I3,I3,I3,D15,8))
```

```
END
```

C ELEMENT JNVS1401
 SUBROUTINE FFORMO(NOC1,NOC2)

C ESTA SUBRUTINA DIRIGE EL CALCULO DE LAS MATRICES FC,FO1 Y FO2
 C EN FORMA DE SUS SUPERVECTORES ASOCIADOS,

C SE HA PROGRAMADO:

```
FC=H+0,5*GC
FO1=(NOC1/2)*H+0,5*GO1
FO1=(NOC2/2)*H+0,5*GO2
```

C LOS DATOS DE ENTRADA A ESTA SUBRUTINA SON:

C -----
 C H:MATRIZ H EN FORMA DE SUPERVECTOR COMMON C19
 C LAS MATRICES G SE CALCULAN EN OGFORM
 C VER ADEMAS LA SUBRUTINA OGFORM
 C LOS RESULTADOS SON:

C -----
 C FC:MATRIZ DE FOCK DE LAS CAPAS CERRADAS PER, 15
 C FO1:MATROZ DE FOCK DE LA CAPA ABIERTA 1 PER, 16
 C FO2:MATRIZ DE FOCK DE LA CAPA ABIERTA 2 PER 17

C UNIDADES PERIFERICAS USADAS 15,16,17(FC,FO1,FO2)

C *****
 C IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
 C COMMON NUMORB,NR,NW,N

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

COMMON/C3/EPS,EPSENT,EPSENO,EPSCOE
COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
COMMON/C7/GC,GO1
COMMON/C8/FCLD(30,30)
COMMON/C10/A(30,30),GO2
COMMON /C17/NOPSHL
COMMON/C19/H
COMMON/C20/IIJ(500),IKL(500),VALINT(500)
COMMON/C24/KK(500),LL(500)
DIMENSION NOC(30),GC(465),GO1(465),GO2(465),F(465),H(465)
C*
      IWRITE=JW
C
C...CALCULO DE LA MATRIZ G DE CADA UNA DE LAS CAPAS CONSIDERADAS
C
      CALL OGFORM(NOC1,NOC2)
C
C
C...CALCULO EFECTIVO DE LA MATRIZ DE FOCK
C
      DO 10 K=1,N
10  F(K)=0,DO
C....CALCULO DE FC Y ESCRITURA SOBRE EL DISCO
      DO 3 K=1,N
3  F(K)=H(K)+0,5*GC(K)
      LI=1
      CALL COPY(A,F,NUMORB,LI)
      NP=15
      IMAT=0
      CALL DWRMAT(NP,A,IMAT)
      IF(IWRITE,EQ,0)GO TO 31
      WRITE(NW,100)
      CALL OUTPUT(NUMORB,A,NW)
31  CONTINUE
      IF(NOPSHL,EQ,0)GO TO 20
C....CALCULO DE FO1 Y ESCRITURA SOBRE EL DISCO
      DO 4 K=1,N
4  F(K)=0,5*(FLOAT(NOC1)*H(K)+GO1(K))
      CALL COPY(A,F,NUMORB,LI)
      NP=16
      CALL DWRMAT(NP,A,IMAT)
      IF(IWRITE,EQ,0)GO TO 41
      WRITE(NW,101)
      CALL OUTPUT(NUMORB,A,NW)
41  CONTINUE
      IF(NOPSHL,EQ,1)GO TO 25
C....CALCULO DE FO2 Y ESCRITURA SOBRE EL DISCO
      DO 5 K=1,N
5  F(K)=0,5*(FLOAT(NOC2)*H(K)+GO2(K))
      CALL COPY(A,F,NUMORB,LI)
      NP=17
      CALL DWRMAT(NP,A,IMAT)
      IF(IWRITE,EQ,0)GO TO 51
      WRITE(NW,102)
      CALL OUTPUT(NUMORB,A,NW)
51  CONTINUE
25  CONTINUE
C
      RETURN
C
C EN EL CASO DE QUE SEAN CAPAS CERRADAS
20  CONTINUE

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

      DO 1 I=1,NUMORB
      DO 2 J=1,NUMORB
100  FCLO(I,J)=A(I,J)
      1 CONTINUE
      RETURN
101  FORMAT(/1H ,30X,'MATRIZ F DE LAS CAPAS CERRADAS')
102  FORMAT(/1H ,30X,'MATRIZ F DE LA CAPA ABIERTA 1')
      END
C     ELEMENT JNVS1303
      SUBROUTINE INORHF(NUMC,NUMO1,NUMO,NOC1,NOC2)
C
C     ENTRADA DE DATOS PARA LAS CAPAS ABIERTAS RESTRICTED H=F
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON NUMORB,NR,NW,NT
      COMMON/A/IWAY(10)
      COMMON/C1/DNUCL(10,3),IZ(10),NUMNUC
      COMMON/C6/ALFA(2,2),BETA(2,2)
      COMMON/C17/NOPSHL
      DIMENSION AMULT(8)
      DATA AMULT/'SINGLETE',' DOBLETE','TRIPLETE','CUADRUPL',
* 'QUINTUPL','SEXTUPL','SEPTUPL',' OCTUPL,'/
C*
      IF(IWAY(3),EQ,2)GO TO 8
C
C     LECTURA DE LOS DATOS
C
C     LEEMOS EL NUMERO DE CAPAS ABIERTAS
      READ(NR,110)NOPSHL
C     LEEMOS EL NUMERO DE ORBITALES MOLECULARES EN CADA CAPA
      READ(NR,110)NCLO,NOPEN1,NOPEN2
C     LEEMOS LOS NUMEROS DE OCUPACION DE LAS CAPAS ABIERTAS
      READ(NR,110)NOC1,NOC2
      IF(NOPSHL,EQ,0)GO TO 6
C
C     INICIALIZAMOS A CERO LAS MATRICES ALFA Y BETA
      DO 2 I=1,2
      DO 1 J=1,2
      ALFA(I,J)=0,D0
      1 BETA(I,J)=0,D0
      2 CONTINUE
C     LEEMOS LAS CONSTANTES ALFA
      DO 3 I=1,NOPSHL
      3 READ(NR,107)(ALFA(I,J),J=1,NOPSHL)
C     LEEMOS LAS CONSTANTES BETA
      DO 5 I=1,NOPSHL
      5 READ(NR,107)(BETA(I,J),J=1,NOPSHL)
      6 CONTINUE
C
C     ESCRITURA DE LOS DATOS
C
      WRITE(NW,109)
      WRITE(NW,102)NOPSHL
      WRITE(NW,115)NCLO,NOPEN1,NOPEN2
      IF(NUMT,GT,NUMORB)GO TO 13
      8 CONTINUE
C     COMPROBAMOS LA DEFINICION DEL PROBLEMA
C     CALCULAMOS LOS INDICES DE LAS CAPAS
C     CERRADAS(NUMC)=1-->NUMC(=NCLO)
C     ABIERTA 1(NUMO1)=NUMC+1-->NOPEN1+NCLO
C     ABIERTA2(NUMO2)=NUMO1+1-->NUMO1+NOPEN2

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C      ABIERTA1+ABIERTA2=NUMO
C
      NUMC=NCLD
      NUMO1=NOPEN1
      NUMO=NOPEN1+NOPEN2
      NOCC=2
      IF(IWAY(3),EQ,2)GO TO 7
C      1-DEFINICION DE LAS CAPAS
C      INICIALIZAMOS A CERO ***
      N1=0
      N2=0
      N3=0
      N4=0
      N5=0
      N6=0
      N7=0
      N8=0
C      ESCRITURA DE LOS PARAMETROS DE DEFINICION DE LAS CAPAS ***
      N1=1
      N2=NUMC
      IF(NOPSHL,EQ,0)GO TO 10
      N3=NUMC+1
      N4=NUMC+NUMO1
      IF(NOPSHL,EQ,1)GO TO 10
      N5=NUMC+NUMO1+1
      N6=NUMC+NUMO
10     CONTINUE
      IF((N2,EQ,NUMORB),OR,(N4,EQ,NUMORB),OR,(N6,EQ,NUMORB))GO TO 11
      N7=NUMC+NUMO+1
      N8=NUMORB
11     CONTINUE
      WRITE(NW,104)NUMORB,N1,N2,NOCC,N3,N4,NOC1,N5,N6,NOC2,N7,N8
      IF((NOPSHL,NE,0),AND,((NOC1,LT,1),OR,(NOC1,GT,2)))GO TO 14
      IF((NOPSHL,EQ,2),AND,((NOC2,LT,1),OR,(NOC2,GT,2)))GO TO 14
C      ESCRITURA Y CALCULO DEL NUMERO DE ELECTRONES DE LA MOLECULA Y DE
C      LA CARGA
      NEL=2*NUMC+NOC1*NOPEN1+NOC2*NOPEN2
      WRITE(NW,113)
      IZT=0
      DO 12 I=1,NUMNUC
12     IZT=IZT+IZ(I)
      NCAR=IZT-NEL
      WRITE(NW,114)NEL,NCAR
C      DEFINICION DEL ESTADO DE LAS CAPAS ABIERTAS
      IF(NOPSHL,EQ,0)GO TO 7
      WRITE(NW,108)
      WRITE(NW,112)
C      LEEMOS LA MULTIPLICIDAD
      READ(NR,110)MULT
      ESTAD=AMULT(MULT)
      WRITE(NW,118)ESTAD
      WRITE(NW,106)
      DO 4 I=1,NOPSHL
4     WRITE(NW,105)I,(ALFA(I,J),J=1,NOPSHL)
      WRITE(NW,108)
      WRITE(NW,111)
      DO 9 I=1,NOPSHL
9     WRITE(NW,105)I,(BETA(I,J),J=1,NOPSHL)
      7 CONTINUE
C*
      RETURN
13 CONTINUE

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

WRITE(NW,116)
STOP
14 CONTINUE
WRITE(NW,117)
STOP
102 FORMAT(1H , 'EL NUMERO DE CAPAS ABIERTAS ES DE =', I2/)
103 FORMAT(1H , 2X, I2, 20X, I4)
104 FORMAT(1H , 'DEFINICION DE LOS ORBITALES QUE INTEGRAN LAS CAPAS'
* /1H , 15X, 'NUMERO TOTAL DE MOS DEL SISTEMA =', I3 /
* /1H , 15X, 'CAPAS CERRADAS : DESDE MO ', I2, ' --> ', I2, ' ; OCUPACION =',
* I2 /
* /1H , 15X, 'CAPA ABIERTA 1 : DESDE MO ', I2, ' --> ', I2, ' ; OCUPACION =',
* I2 /
* /1H , 15X, 'CAPA ABIERTA 2 : DESDE MO ', I2, ' --> ', I2, ' ; OCUPACION =',
* I2 /
* /1H , 15X, 'CAPA VIRTUALES : DESDE MO ', I2, ' --> ', I2, ' ; VACANTES' //)
105 FORMAT(1H , 15X, I2, 3X, 2(D15.8, 2X))
106 FORMAT(1H , 20X, 'MATRIZ ALFA' /1H , 20X, 49(1H-) /1H , 27X, '1', 16X, '2' //)
107 FORMAT(3D10, 3)
108 FORMAT(/////1H )
109 FORMAT(1H , 10X, 'DATOS DEL SISTEMA' //)
110 FORMAT(30I2)
111 FORMAT(1H , 20X, 'MATRIZ BETA' /1H , 20X, 49(1H-) /1H , 27X, '1', 16X, '2' //)
112 FORMAT(1H , 'DEFINICION DEL ESTADO ELECTRONICO' //)
113 FORMAT(//1H , 'CARGA Y NUMERO DE ELECTRONES DE LA MOLECULA' //)
114 FORMAT(1H , 10X, 'NUMERO DE ELECTRONES =', I5 /1H , 10X, 'CARGA TOTAL DEJ
* LA MOLECULA =', I3 //)
115 FORMAT(1H , 10X, 'MO DOBLEMENTE OCUPADOS =', I2 /1H , 10X, 'MO EN LA CAPA
* ABIERTA 1 =', I2 /1H , 10X, 'MO EN LA CAPA ABIERTA 2 =', I2 //)
116 FORMAT(1H1, 'ERROR EN LA ASIGNACION DEL NUMERO DE ORBITALES DE LAS
* CAPAS, EXCEDE EL TOTAL DE ORBITALES')
117 FORMAT(1H1, 'ASIGNACION ERRONEA DE LOS NUMEROS DE OCUPACION DE LAS
* CAPAS')
118 FORMAT(//1H , 10X, 'LA MULTIPLICIDAD ES =', A8 //1H , 10X, 'LOS PARAMET
* ROS DE LAS CAPAS (ALFA Y BETA) SON:' //)
END
C ELEMENT JNVS1701
SUBROUTINE PICLO(NUMO)
C
C CALULO DEL OPERADOR PIC=PC+PV
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB, NR, NW, NT
COMMON/C7/P1, P2
COMMON/C10/PIT, PI
DIMENSION PI(465), P1(465), P2(465), PIT(30, 30)
IVEC=1
DO 3 I=1, NT
3 P1(I)=0, DO
IF(NUMO, EQ, NUMORB) GO TO 5
C
C LEEMOS PV
C
NP=14
CALL DWRVEC(NP, P1, IVEC)
5 CONTINUE
LEEMOS PC
NP=1
CALL DWRVEC(NP, P2, IVEC)
C CALCULO DE PIC
DO 4 I=1, NT
4 PI(I)=P1(I)+P2(I)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

LI=1
CALL COPY(PIT,PI,NUMORB,LI)
RETURN
END
C ELEMENT JNVS1502
SUBROUTINE ODIAG
C SUBROUTINA PARA EL CALCULO DE LA NUEVA MATRIZ C DE VECTORES PROPIOS
C
C LOS DATOS DE ENTRADA A LA SUBROUTINA SON:
C -----
C MATRIZ S**(-1/2) PER. 18
C MATRIZ S**(1/2) PER. 19
C RT; OPERADOR DE ACOPLAMIENTO TOTAL COMMON C8
C
C LOS DATOS DE SALIDA SON:
C RT; NUEVA MATRIZ DE COEFICIENTES COMMON C8
C R1; NUEVA MATRIZ DE VALORES PROPIOS COMMON C13
C NOC; VECTOR CUYOS ELEMENTOS SON LOS VALORES PROPIOS
C DE LAS ENERGIAS ORBITALES COMMON C2
C
C*
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/C2/ANOC(30),NPE
COMMON/C3/EP,EP1,EP2,EP3
COMMON/C7/A(465),B(465)
COMMON/C8/RT(30,30)
COMMON/C10/S(30,30),AUX(465)
COMMON/C13/R1(30,30)
COMMON/C17/NOPSHL
DIMENSION D(30,30)
C
C,,,DIAGONALIZACION DEL OPERADOR DE ACOPLAMIENTO TOTAL TRANSFORMADO A
C LA BASE ORTOGONAL
C
C LEEMOS S**(1/2)
NP=19
IMAT=1
CALL DWRMAT(NP,S,IMAT)
C OBTENCION DE R1=S**(1/2)*RT*S**(1/2)
DO 1 I=1,NUMORB
DO 2 J=1,NUMORB
2 D(I,J)=S(I,J)
1 CONTINUE
CALL MMULT(S,RT,D,R1,NUMORB)
C DIAGONALIZACION DE R1
MV=0
CALL EIGEND(R1,D,NUMORB,MV,EP)
C
C INTRODUCIMOS LOS VALORES PROPIOS EN EL VECTOR NOC
DO 3 I=1,NUMORB
3 ANOC(I)=R1(I,I)
C,,,CALCULO DE LA NUEVA MATRIZ C
C
C LEEMOS S**(-1/2)
NP=18
CALL DWRMAT(NP,S,IMAT)
C OBTENCION DE LA MATRIZ C A PARTIR DE LA MATRIZ D
C OBTENEMOS LA MATRIZ D=S**(1/2)*C
C SE GUARDA EN RT
CALL MMULD(S,D,RT,NUMORB)
RETURN

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C      END
C      ELEMENT JNVS1702
C      SUBROUTINE PIOP1
C
C      CALCULO DE  $PI01 = PO1 + PV$ 
C
C      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C      COMMON NUMORB, NR, NW, NT
C      COMMON/C7/P1(465), P2(465)
C      COMMON/C10/PIT(30,30), PI(465)
C
C      LEEMOS PO1
C      IVEC=1
C      NP=2
C      CALL DWRVEC(NP, P2, IVEC)
C      CALCULO DE  $PI01$ 
C      DO 5 I=1, NT
C      5  PI(I)=P1(I)+P2(I)
C      LI=1
C      CALL COPY(PIT, PI, NUMORB, LI)
C      RETURN
C      END
C      ELEMENT JNVS1703
C      SUBROUTINE PIOP2
C
C      CALCULO DE  $PI02 = PO2 + PV$ 
C
C      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C      COMMON NUMORB, NR, NW, NT
C      COMMON/C7/P1(465), P2(465)
C      COMMON/C10/PIT(30,30), PI(465)
C
C      LEEMOS PO2
C      IVEC=1
C      NP=26
C      CALL DWRVEC(NP, P2, IVEC)
C      CALCULO DE  $PI02$ 
C      DO 6 I=1, NT
C      6  PI(I)=P1(I)+P2(I)
C      LI=1
C      CALL COPY(PIT, PI, NUMORB, LI)
C      RETURN
C      END
C      ELEMENT JNVS1801
C      SUBROUTINE FDIFER(IDIF)
C
C      SUBROUTINA AUXILIAR PARA CALCULAR LAS DIFERENCIAS (FC-F01), (FC-F02)
C      O (F01-F02) SEGUN EL VALOR DE IDIF
C
C      LOS DATOS DE ENTRADA SON:
C      -----
C      FC: MATRIZ DE FOCK DE LAS CAPAS CERRADAS          PER. 15
C      F01: MATRIZ DE FOCK DE LA CAPA ABIERTA 1          PER. 16
C      F02: MATRIZ DE FOCK DE LA CAPA ABIERTA 2          PER. 17
C      IDIF: INDICADOR DE LA DIFERENCIA DESEADA
C      IDIF=1-->FC-F01
C      IDIF=2-->FC-F02
C      IDIF=3-->F01-F02
C      RESULTADOS:
C      -----
C      FDIF: MATRIZ DE LA DIFERENCIA                      COMMON C10
C
C      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

COMMON NUMORB,NR,NW
COMMON/C10/FDIF(30,30),F(465)
COMMON/C13/F2(30,30)
DIMENSION F1(30,30)
C
C  COMENZAMOS EL CALCULO
C
    IMAT=1
    GO TO (1,2,3),IDIF
C
    FC=FO1
    1 CONTINUE
    NP=15
    CALL DWRMAT(NP,F1,IMAT)
    NP=16
    CALL DWRMAT(NP,F2,IMAT)
    GO TO 4
C
    CALCULO DE FC=FO2
    2 CONTINUE
    NP=17
    CALL DWRMAT(NP,F2,IMAT)
    GO TO 4
C
    CALCULO DE FO1=FO2
    3 CONTINUE
    NP=16
    CALL DWRMAT(NP,F1,IMAT)
C
    4 CONTINUE
C
    DO 5 I=1,NUMORB
    DO 6 J=1,NUMORB
    6 FDIF(I,J)=F1(I,J)-F2(I,J)
    5 CONTINUE
    RETURN
    END
C
    ELEMENT JNVS1601
    SUBROUTINE RTFORM(NUMO,IFORM,ALANDA)
C
    CON ESTA SUBROUTINA CALCULAMOS EL OPERADOR DE ACOPLAMIENTO TOTAL
C
    SE HA PROGRAMADO EL ALGORITMO:
C
    RT=RO+T
C
    RO:MATRIZ DE LA PARTE ASOCIADA AL GRADIENTE DEL
    OPERADOR DE ACOPLAMIENTO TOTAL            COMMON C8
C
    T:MATRIZ ASOCIADA A LA PARTE HERMITICA DEL
    OPERADOR DE ACOPLAMIENTO TOTAL            COMMON C23
C
    LOS RESULTADOS SON:
C
    -----
C
    RT:MATRIZ DEL OPERADOR DE ACOPLAMIENTO            COMMON C8
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/C5/N1,N2,N3,N4,N5,IW
COMMON/C7/A(465),B(465)
COMMON/C8/RT
COMMON/C10/F(30,30),OAU(465)
COMMON/C13/RO
COMMON/C17/NOPSHL

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

COMMON/C23/T
DIMENSION RT(30,30),RO(30,30),T(30,30)
C
C...CALCULO DE RO
C SE GUARDA EN RT LA PARTE RO
C
CALL ROFORM(NUMO)
IF(IW,NE,0)GO TO 1
WRITE(NW,100)
CALL OUTPUT(NUMORB,RT,NW)
1 CONTINUE
C
GO TO (3,4),IFORM
4 CONTINUE
C
C...CALCULO DE T
C LA PARTE T SE OBTIENE SOBRE LA MATRIZ T SIN PONDERAR
C
CALL TFORM
C
IF(IW,NE,0)GO TO 2
WRITE(NW,101)
CALL OUTPUT(NUMORB,T,NW)
2 CONTINUE
C...PONDERACION DE LA PARTE HERMITICA DEL OPERADOR DE ACOPLAMIENTO POR
C EL PARAMETRO LANDA
C
DO 5 I=1,NUMORB
DO 6 J=1,NUMORB
6 T(I,J)=ALANDA*T(I,J)
5 CONTINUE
C
C...OBTENCION DEL OPERADOR DE ACOPLAMIENTO TOTAL CORREGIDO
C
CALL SUM(RT,T,NUMORB)
IF(IW,NE,0)GO TO 6
CALL OUTPUT(NUMORB,RT,NW)
6 CONTINUE
RETURN
C
C
3 CONTINUE
C
RETURN
100 FORMAT(1H ,30X,'OPERADOR DE ACOPLAMIENTO,PARTE GRADIENTE')
101 FORMAT(1H ,30X,'OPERADOR DE ACOPLAMIENTO,PARTE HERMITICA')
END
C
ELEMENT JNVS1602
SUBROUTINE ROFORM (NUMO)
C
C CALCULO DE LA PARTE RO DEL OPERADOR DE PROYECCION TOTAL
C SE OBTIENE COMO LA SUMA DE TRES COMPONENTES:
C RO1=PI C*FC*PI C+
C +PI I01*FO1*PI I01+
C +PI I02*FO2*PI I02
C
C
C PIC=PC+PV
C PI01=PO1+PV
C PI02=PO2+PV
C

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C     DONDE:
C     PC:PROYECTOR DE LAS CAPAS CERRADAS                PER,  1
C     PO1:PROYECTOR DE LA CAPA ABIERTA 1                PER,  2
C     PO2:PROYECTOR DE LA CAPA ABIERTA 2                PER, 26
C     PV:PROYECTOR DE LAS CAPAS VIRTUALES              PER, 14
C     FC:MATRIZ DE FOCK DE LAS CAPAS CERRADAS          PER, 15
C     FO1:MATRIZ DE FOCK DE LA CAPA ABIERTA 1          PER, 16
C     FO2:MATRIZ DE FOCK DE LA CAPA ABIERTA 2          PER, 17
C     EL RESULTADO ES:
C     -----
C     RO1:MATRIZ ASOCIADA A LA PARTE DEL GRADIENTE DEL OPERADOR
C           DE ACOPLAMIENTO                                COMMON C8

```

```

C     IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C     COMMON NUMORB,NR,NW,NT
C     COMMON/C7/P1(465),P2(465)
C     COMMON/C8/RO1(30,30)
C     COMMON/C10/A(30,30),B(465)
C     COMMON/C13/RO(30,30)
C     COMMON/C17/NOPSHL
C     COMMON/C23/R(30,30)

```

```

C     ...CALCULO DE LA COMPONENTE DE LAS CAPAS CERRADAS ...

```

```

C     CALCULO DE PIC
C     CALL PICLO(NUMO)
C     LEEMOS FC
C     NP=15
C     IMAT=1
C     CALL DWRMAT(NP,RO,IMAT)
C     CALL OUTPUT(NUMORB,RO,NW)
C     CALCULO DE PIC*FC*PIC
C     CALL MMULT(A,RO,A,R,NUMORB)
C     CALL OUTPUT(NUMORB,A,NW)
C     CALL OUTPUT(NUMORB,R,NW)
C     INICIALIZAMOS RO1
C     DO 1 I=1,NUMORB
C     DO 2 J=1,NUMORB
C     2 RO1(I,J)=R(I,J)
C     1 CONTINUE
C     IF(NOPSHL,EQ,0)GO TO 10

```

```

C     ...CALCULO DE LA COMPONENTE DE LA CAPA ABIERTA 1 ...

```

```

C     CALCULO DE PIO1
C     CALL PIOP1
C     LEEMOS FO1
C     NP=16
C     CALL DWRMAT(NP,RO,IMAT)
C     CALCULO DE PIO1*FO1*PIO1
C     CALL MMULT(A,RO,A,R,NUMORB)
C     CALL SUM(RO1,R,NUMORB)
C     IF(NOPSHL,EQ,1)GO TO 10

```

```

C     ...CALCULO DE LA COMPONENTE DE LA CAPA ABIERTA 2 ...

```

```

C     CALCULO DE PIO2
C     CALL PIOP2
C     LEEMOS FO2
C     NP=17
C     CALL DWRMAT(NP,RO,IMAT)
C     CALCULO DE PIO2*FO2*PIO2

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

CALL MMULT(A,R0,A,R,NUMORB)
CALL SUM(R01,R,NUMORB)
C
C 10 CONTINUE
C***
RETURN
END
C
C ELEMENT JNV51603
C SUBROUTINE TForm
C
C EN ESTA SUBROUTINA CALCULAMOS LA PARTE T DEL OPERADOR DE ACOPLA-
C MIENTO TOTAL:
C*
C EL ALGORITMO PROGRAMADO ES:
C
C      T=ALANDA*(PO1*(FC-F01)*PC+PC*(FC-F01)*PO1+
C          +PO2*(FC-F02)*PC+PC*(FC-F02)*PO2+
C          +PO2*(F01-F02)*PO1+PO1*(F01-F02)*PO2)
C
C LOS DATOS DE ENTRADA SON:
C -----
C PC:MATRIZ DEL PROYECTOR DE LAS CAPAS CERRADAS          PER, 1
C PO1:MATRIZ DEL PROYECTOR DE LA CAPA ABIERTA 1          PER, 2
C PO2:MATRIZ DEL PROYECTOR DE LA CAPA ABIERTA 2          PER, 26
C FC-F01=FDIF                                             COMMON C10
C FC-F02=FDIF                                             COMMON C10
C F01-F02=FDIF                                           COMMON C10
C LOS RESULTADOS SON:
C -----
C T:MATRIZ T ASOCIADA A LA PARTE HERMITICA DEL OP, DE
C                               ACOPLAMIENTO              COMMON C23
C
C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,NR,NW,NT
COMMON/C10/FDIF,P
COMMON/C13/TO
COMMON/C17/NOPSHL
COMMON/C23/T
DIMENSION T(30,30),P1(30,30),P2(30,30),P(465),FDIF(30,30),TO(30,30)
C *)
C
C ...INICIALIZAMOS A CERO
C
DO 1 I=1,NUMORB
DO 2 J=1,NUMORB
2 T(I,J)=0,DO
1 CONTINUE
LI=1
IVEC=1
C
C
C ...CALCULO DE PC*(FC-F01)*PO1+PO1*(FC-F01)*PC
C
C CALCULAMOS LA DIFERENCIA FC-F01
I=1
3 CALL FDIFER(I)
LEEMOS PC
NP=1
CALL DWRVEC(NP,P,IVEC)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C      CALL COPY(P1,P,NUMORB,LI)
C      LEEMOS PO1
      NP=2
      CALL DWRVEC(NP,P,IVC)
      CALL COPY(P2,P,NUMORB,LI)
      CALL MMULT(P1,FDIF,P2,TO,NUMORB)
      CALL SUM(T,TO,NUMORB)
      CALL MMULT(P2,FDIF,P1,TO,NUMORB)
      CALL SUM(T,TO,NUMORB)
      IF(NOPSHL.EQ,1)GO TO 10
C
C      CALCULO DE  $PC*(FC-F02)*PO2+PO2*(FC-F02)*PC$ 
C
C      LEEMOS FC-F02
      I=2
4     CALL FDIFER(I)
C      LEEMOS PO2
      NP=26
      CALL DWRVEC(NP,P,IVC)
      CALL COPY(P2,P,NUMORB,LI)
      CALL MMULT(P1,FDIF,P2,TO,NUMORB)
      CALL SUM(T,TO,NUMORB)
      CALL MMULT(P2,FDIF,P1,TO,NUMORB)
      CALL SUM(T,TO,NUMORB)
C
C      CALCULO DE  $PO1*(F01-F02)*PO2+PO2*(F01-F02)*PO1$ 
C
C      LEEMOS F01-F02
      I=3
5     CALL FDIFER(I)
C      LEEMOS PO1
      NP=2
      CALL DWRVEC(NP,P,IVC)
      CALL COPY(P1,P,NUMORB,LI)
      CALL MMULT(P1,FDIF,P2,TO,NUMORB)
      CALL SUM(T,TO,NUMORB)
      CALL MMULT(P2,FDIF,P1,TO,NUMORB)
      CALL SUM(T,TO,NUMORB)
C
10    CONTINUE
      RETURN
      END
C      ELEMENT JNV50202
      SUBROUTINE SCAN(NSCAN)
C      -----
C
C      CALCULO DE UNA SERIE DE PUNTOS EN LA SUPERFICIE DE ENERGIA.
C
C      LOS INCREMENTOS DE UN PUNTO A OTRO DEL BARRIDO SERAN LOS MISMOS
C      EN TODOS LOS CASOS Y SU VALOR SE ESPECIFICA EN LA SUBROUTINA SCAN.
C
C      USAMOS ESTAS VARIABLES:
C
C      *IAN(I)=NUMERO ATOMICO DEL ATOMO CONSIDERADO
C      *IZ(I,1)=ATOMO AL QUE ESTA UNIDO EL IAN(I)
C      *IZ(I,2)=ATOMO QUE NOS SIRVE PARA DEFINIR EL ANGULO PLANO
C      *IZ(I,3)=ATOMO QUE NOS SIRVE PARA DEFINIR JUNTO CON IZ(I,1),IZ(I,2)
C      )EL PLANO DE REFERENCIA.
C      *IZ(I,4)=NUMERO QUE NOS INDICA LA POSICION DEL ATOMO IAN(I) CON
C      RESPECTO AL PLANO DE REFERENCIA
C      IZ(I,4)=0   ESTA EN EL PLANO
C      IZ(I,4)=+1  ESTA POR ENCIMA DEL PLANO

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C      IZ(I,4)=-1 ESTA POR DEBAJO DEL PLANO J
C      *BL(J)=LONGITUDES DE ENLACE J
C      *ALPHA(I)=ANGULO ENTRE LOS ATOMOS IAN(I), IZ(I,1), IZ(I,2) MEDIDO J
C      DESDE IAN(I) ---> IZ(I,1) EN SENTIDO OPUESTO A LAS AGUJAS DEL J
C      RELOJ J
C      *BETA(I)=ANGULO DIEDRO FORMADO POR IAN(I) CON EL PLANO IZ(I,1), J
C      IZ(I,2), IZ(I,3) SIENDO EL EJE DE GIRO DEL CITADO ANGULO EL J
C      IZ(I,1) ---> IZ(I,2) Y EN EL SENTIDO INDICADO, SE CONSIDERA POSITIVO J
C      EL SENTIDO CONTRARIO A LAS AGUJAS DEL RELOJ. J
C      *NZ=NUMERO DE ATOMOS (REALES+FICTICIOS) CUYAS COORDENADAS HEMOS J
C      *IPAR(I,J)=PARAMETROS QUE VARIAMOS EN DX(J) J
C      *NIPAR(J)=NUMERO DE PARAMETROS QUE VARIAMOS EN UN VALOR DX(J) J
C      *NPAR=VARIABLE OCULTA J
C      *NSTEP=VARIABLE PARA EL CONTROL DE PROGRAMA, SI VALE 0 EL BARRIDO J
C      COMIENZA EN UN PUNTO CUYAS COORDENADAS SE LEEN, SI VALE CUAL- J
C      QUIER OTRO VALOR, LAS COORDENADAS DEL PUNTO INICIAL SE SUPONEN J
C      CONOCIDAS POR EL PROGRAMA. J
C      *XX(I), NZZ=VARIABLES OCULTAS J
C      *DX(J)=VALOR DE LA CORRECCION A LOS PARAMETROS J
C      *NUM=NUMERO DE TARJETAS DE VARIACIONES SIMULTANEAS LEIDAS J
C      LEIDO J
C      *NUMB=NUMERO DE PUNTOS DEL BARRIDO J
C
C      DATOS DE ENTRADA J
C
C*
C      COMO RESULTADO, OBTENEMOS LAS COORDENADAS DE CADA UNO DE LOS ATOMOS J
C      EN SU FORMA CARTESIANA, LAS UNIDADES DE LAS MISMAS SON A, A, SI SE J
C      INTRODUCEN EN A, U. J
C
C      ----- J
C      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z) J
C      COMMON NUMORB, IN, IOUT, NT J
C      COMMON/START/NNRNW J
C      COMMON/A/IWAY(10) J
C      COMMON/ACELE/IACEL J
C      COMMON/C1/DNUCL(10,3), IZ(10), NUMNUC J
C      COMMON/C2/NOC(30), NPE J
C      COMMON/C3/EPS, EPSENT, EPSEN0, EPSCOE J
C      COMMON/C4/TIPO J
C      COMMON/C5/NUMITE, NNN, IR, INR, INC, IW J
C      COMMON/C6/ALFA(2,2), BETA(2,2) J
C      COMMON/C7/H(465), T(465) J
C      COMMON/C8/C(30,30) J
C      COMMON/C11/DBORB, NNUCL(30), ITO RB(30) J
C      COMMON/C16/NOPEN1, NOPEN2, NCLO, NOC1, NOC2 J
C      COMMON/C17/NOPSHL J
C      COMMON/ZMAT/IANZ(15), IAN(15,4), BL(15), ALPHA(15), BET(15), NZ, NZZ, J
C      *IPAR(15,5), NIPAR(5), NPAR, NSTEP, XX(5), DX(5), NUM, NUMB J
C      DATA ANTOAU/1.889762D0/ J
C      DATA ZERO/0.0D0/, ONE/1.0D0/, TWO/2.0D0/ J
C      DATA MAXPAR/15/, MAXCD/5/ J
C
C      NSTEP=NSCAN J
C
C      ENTRADA DE DATOS PARA EL PRIMER PUNTO J
C      I=0 J
C      IF(NSTEP, NE, 0) GO TO 450 J
C      I=I+1 J
C      WRITE(IOUT, 1110) I J
C      CALL COORIN J
C      CALL PRINTZ J

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

CALL SCF
IWAY(3)=2
450 CONTINUE
C ENTRADA DE LAS CORRECCIONES
CALL SCAIN
460 NUMB=NUMB-1
IF(NUMB)470,480,470
C*
C CALCULAMOS LOS PUNTOS DESEADOS.
C
C CALCULAMOS LOS NUEVOS VALORES DE LOS PARAMETROS
470 CONTINUE
I=I+1
WRITE(IOUT,1110)I
CALL ZSCALE(ZERO,ONE)
C ESCRIBO LAS CORDENADAS DEL NUEVO PUNTO
CALL PRINTZ
C FORMAMOS LA NUEVA MATRIZ C
CALL BUILDZ
C REALIZAMOS LA AUTOCONSISTENCIA
CALL SCF
GO TO 460
C*
C FINALIZA EL PROCESO DE CALCULO DE LOS PUNTOS
480 WRITE(IOUT,1120)
RETURN
1110 FORMAT(1H ,'PUNTO NUMERO ',I2//)
1120 FORMAT(1H1,'FIN DEL BARRIDO DE PUNTOS SOBRE LA SUPERFICIE DE POTEN
*CJAL')
END
C ELEMENT JNVS0201
SUBROUTINE SCAIN
C
C LEEMOS LAS CORRECCIONES QUE HEMOS DE INTRODUCIR EN CADA PUNTO
C DE LA SUPERFICIE DE POTENCIAL QUE YA HEMOS CALCULADO PARA OBTENER
C LAS COORDENADAS DEL NUEVO
C
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON NUMORB,IN,IOUT
COMMON/ZMAT/IANZ(15),IZ(15,4),BL(15),ALPHA(15),BETA(15),NZ,NZZ,
*IPAR(15,5),NIPAR(5),NPAR,NSTEP,XX(5),DX(5),NUM,NUMB
DATA ZERO/0,0D0/
DATA MAXPAR/15/,MAXCD/5/
DO 38 I=1,MAXCD
38 XX(I)=ZERO
C
C LEEMOS EL NUMERO DE PUNTOS DEL BARRIDO
C
READ(IN,1010)NUMB
C
C LEEMOS LAS VARIACIONES
C
DO 440 J=1,MAXCD
READ(IN,1040)(IPAR(I,J),I=1,MAXPAR),DX(J)
DO 420 I=1,MAXPAR
IF(IPAR(I,J)-99)410,440,410
410 IF(IPAR(I,J))420,450,420
420 CONTINUE
NIPAR(J)=MAXPAR
NUM=J
GO TO 450
440 NIPAR(J)=I-1

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

450 NIPAR(J)=I-1
    NUM=J
C
C   ESCRIBIMOS LAS CORRECCIONES
C
    WRITE(IOUT,1030)
    WRITE(IOUT,1050)
    DO 430 J=1,NUM
430  WRITE(IOUT,1020)(IPAR(I,J),I=1,MAXPAR),DX(J)
    WRITE(IOUT,1050)
    RETURN
1010 FORMAT(2I2)
1020 FORMAT(1H ,15(12,2X),10X,D15,8)
1030 FORMAT(1H ,,PARAMETROS A VARIAR,,41X,,VALOR ,)
1040 FORMAT(15I2,D10,4)
1050 FORMAT(1H ,60(1H*),10X,15(1H*))
    END
C   ELEMENT JNV50203
    SUBROUTINE ZSCALE(TXX,TDX)
C*
C   -----
C   QCPE VERSION
C   DECEMBER 1971
C   -----
C*
C   SUBROUTINA PARA INTRODUCIR LAS VARIACIONES EN LAS COORDENADAS
C   INTERNAS
C
C   EL METODO SEGUIDO HA SIDO SUMAR LA CORRECCION DX(J) A CADA COOR-
C   DENADA INTERNA, PARA ELLO SE HA SUPUESTO QUE LAS COORDENADAS
C   INTERNAS SE HALLAN NUMERADAS DE FORMA QUE
C   IPAR(I,J)=1--->IPAR(I,J)=NZ-1  LONGITUDES DE ENLACE
C   IPAR(I,J)=NZ-1--->IPAR(I,J)=2*NZ-3  ANGULOS PLANOS
C   IPAR(I,J)=2*NZ-3--->IPAR(I,J)=3*NZ-6  ANGULOS DIEDROS
C   CUALQUIER PARAMETRO HA DE ESTAR COMPRENDIDO ENTRE 1 Y 3NZ-6
C   SI NO HAY ERROR
C*
    IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C*
    COMMON NUMORB,NR,NW
    COMMON/ZMAT/IANZ(15),IZ(15,4),BL(15),ALPHA(15),BETA(15),NZ,NZZ,
    *IPAR(15,5),NIPAR(5),NPAR,NSTEP,XX(5),DX(5),NUM,NUMB
C*
C*
C   .....
    DO 60 J=1,NUM
    NPARR=NIPAR(J)
    DO 60 I=1,NPARR
    K=IPAR(I,J)
    K1=K-NZ+1
C   PREGUNTA POR EL TIPO DE PARAMETRO A VARIAR
    IF(K1)10,10,20
C   VARIACION DE LAS LONGITUDES DE ENLACE
10  CONTINUE
    K2=K+1
    BL(K2)=BL(K2)-TXX*XX(J)+TDX*DX(J)
    GO TO 60
C
20  CONTINUE
    K3=K-2*NZ+3
    IF(K3)30,30,40
C   VARIACION DE LOS ANGULOS PLANOS

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

30 CONTINUE
   K4=K-NZ+3
   ALPHA(K4)=ALPHA(K4)-TXX*XX(J)+TDX*DX(J)
   GO TO 60
C
40 CONTINUE
   K5=K-3*NZ+6
   IF(K5)50,50,70
C VARIACION DE LOS ANGULOS DIEDROS
50 CONTINUE
   K6=K-2*NZ+6
   BETA(K6)=BETA(K6)-TXX*XX(J)+TDX*DX(J)
60 CONTINUE
C .....
   RETURN
70 WRITE (IOUT,1000)
   STOP
1000 FORMAT(1H1,'INTENTAMOS VARIAR UN PARAMETRO INEXISTENTE.ERROR EN
   *ZSCALE')
   END
SUBROUTINE COORIN
C-----
C
C LECTURA DE LAS COORDENADAS DE LOS NUCLEOS EN COORDENADAS INTERNAS
C-----
C
C IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C COMMON NUMORB,IN,IOUT
C COMMON/C1/DNUCL,IAN,NUMNUC
C COMMON/ZMAT/IANZ(15),IZ(15,4),BL(15),ALPHA(15),BETA(15),NZ,NZZ,
C *IPAR(15,5),NIPAR(5),NPAR,NSTEP,XX(5),DX(5),NUM, IDUM
C DIMENSION DNUCL(10,3),IAN(10)
C*
C DATA ZERO/0.0D0/
C*
C*
C COMENZAMOS LA LECTURA DE LOS DATOS
C SE LEE HASTA QUE SE ENCUENTRA UN CERO ENTRE LAS COLUMNAS 4 Y 8.
C READ(IN,1020) IANZ(1)
   IZ(1,1)=0
   IZ(1,2)=0
   IZ(1,3)=0
   IZ(1,4)=0
   BL(1)=ZERO
   ALPHA(1)=ZERO
   BETA(1)=ZERO
   I=1
20 I=I+1
   READ (IN,1020) IANZ(I),IZ(I,1),BL(I),IZ(I,2),ALPHA(I),IZ(I,3),
   *BETA(I),IZ(I,4)
   IF(IZ(I,1))20,30,20
C CALCULAMOS EL NUMERO DE NUCLEOS(VERDADEROS Y FICTICIOS) QUE
C HEMOS DEFINIDO.
30 NZ=I-1
C*
C COMPROBAMOS QUE LOS ATOMOS NO ESTAN SUPERPUESTOS
DO 10 I=1,NZ
   II=I+1
   DO 15 J=II,NZ
     IF((IZ(I,1),EQ,IZ(J,1)),AND.(BL(I),EQ,BL(J)),AND,
C * (IZ(I,3),EQ,IZ(J,3)),AND.(ALPHA(I),EQ,ALPHA(J)),AND,

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

* (BETA(I),EQ,BETA(J)),AND,(IZ(I,4).EQ,IZ(J,4)))GO TO 40
15 CONTINUE
10 CONTINUE
RETURN
40 CONTINUE
WRITE(IOUT,1010)
WRITE(IOUT,1030)I,J
CALL PRINTZ
STOP
1010 FORMAT(1H1,10X,'*** GEOMETRIA ERRONEA,DOS ATOMOS TIENEN LAS MISMAS
* COORDENADAS ***')
1020 FORMAT(15,15,D10,4,15,D10,4,15,D10,4,15)
1030 FORMAT(1H,10X,'*** EL ATOMO ',I2,' Y EL ATOMO ',I2,'***')
END
SUBROUTINE BUILDZ
C*
C -----
C @CPE VERSION
C DECEMBER 1971
C -----
C*
C SUBROUTINE TO BUILD A MOLECULE FROM ITS Z MATRIX
C USED IN CONJUNCTION WITH SUBROUTINE VGEOM
C*
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C*
C*
COMMON NUMORB,IN,IOUT
COMMON/C1/C,IAN,NUMNUC
COMMON/ZMAT/IANZ(15),IZ(15,4),BL(15),ALPH(15),BET(15),NZ,NZZ,
*IPAR(15,5),NIPAR(5),NPAR,NSTEP,XX(5),DX(5),NUM,NUMB
C*
DIMENSION C(10,3),IAN(10)
DIMENSION ALPHA(15),BETA(15)
DIMENSION A(15),B(15),CZ(15,3),D(15),U1(3),U2(3),U3(3),U4(3),
*VJ(3),VP(3),V3(3)
C*
DATA ZERO/0,0D0/,ONE/1,0D0/,TWO/2,0D0/
DATA TENM5/1,0D-5/,TENM6/1,0D-6/
DATA TORAD/1,74532925199D-02/
DATA PI/3,141592654D0/
C*
C*
C ZERO TEMPORARY COORDINATE ARRAY CZ
6 DO 10 I=1,NZ
DO 15 J=1,3
15 CZ(I,J)=ZERO
10 CONTINUE
C CONVERT ANGLES FROM DEGREES TO RADIANS
DO 20 I=1,NZ
ALPHA(I)=ALPH(I)*TORAD
20 BETA(I)=BET(I)*TORAD
C*
C*
C TRANSFORMATION BEGINS
C * ATOM 1 ON THE ORIGIN
C * ATOM 2 ON THE Z AXIS
CZ(2,3)=BL(2)
IF(NZ-3)260,30,30
C * ATOM 3 ON THE X-Z PLANE
30 CZ(3,1)=BL(3)*DSIN(ALPHA(3))
IF(IZ(3,1)-1)50,40,50

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C          3 BONDED TO 1
40 CZ(3,3)=BL(3)*DCOS(ALPHA(3))
   GO TO 60
C          3 BONDED TO 2
50 CZ(3,3)=CZ(2,3)-BL(3)*DCOS(ALPHA(3))
C          * ATOM 4 AND SS.
60 DO 80 I=4,NZ
   IF(DABS(CZ(I-1,1))-TENM5)70,90,90
C          *** LINEAL SHAPE FOR MOLECULE
70 CZ(I,1)=BL(I)*DSIN(ALPHA(I))
   ITEMP=IZ(I,1)
   JTEMP=IZ(I,2)
80 CZ(I,3)=CZ(JTEMP,3)-BL(I)*DCOS(ALPHA(I))*DSIGN(ONE,CZ(JTEMP,3))
   *-CZ(JTEMP,3)
C          *** NON LINEAL
90 K=I
   IF(K=NZ)100,100,260
100 DO 250 J=K,NZ
   DCAJ=DCOS(ALPHA(J))
   DSAJ=DSIN(ALPHA(J))
   DCBJ=DCOS(BETA(J))
   DSBJ=DSIN(BETA(J))
   WRITE(6,1000)DCAJ,DSAJ,DCBJ,DSBJ
1000 FORMAT(1H ,10(D13,6,2X))
   IF(IZ(J,4))135,110,135
C          ***ATOM 4 ON 1-2-3 PLANE
110 CALL VEC(U1,CZ,IZ(J,2),IZ(J,3))
   CALL VEC(U2,CZ,IZ(J,1),IZ(J,2))
   CALL VPROD(VP,U1,U2)
   R=DSQRT(ONE-(U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3))**2)
   WRITE(6,1000)R
   DO 120 I=1,3
120 U3(I)=VP(I)/R
   CALL VPROD(U4,U3,U2)
   DO 130 I=1,3
   VJ(I)=BL(J)*(-U2(I)*DCAJ+U4(I)*DSAJ*DCBJ+U3(I)*DSAJ*DSBJ)
   ITEMP=IZ(J,1)
130 CZ(J,I)=VJ(I)+CZ(JTEMP,I)
   GO TO 250
135 IF(IABS(IZ(J,4))-1)210,140,210
C          ***ATOM 4 OVER 1-2-3 PLANE
140 CALL VEC(U1,CZ,IZ(J,1),IZ(J,3))
   CALL VEC(U2,CZ,IZ(J,2),IZ(J,1))
   ZETA=- (U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3))
   A(J)=(-DCBJ+ZETA*DCAJ)/(ONE-ZETA*ZETA)
   B(J)=(DCAJ-ZETA*DCBJ)/(ONE-ZETA*ZETA)
   R=ZERO
   GAMMA=PI/TWO
   IF(ZETA)150,170,160
150 R=PI
160 GAMMA=DATAN(DSQRT(ONE-ZETA*ZETA)/ZETA)+R
   WRITE(6,1000)ZETA,GAMMA
170 D(J)=ZERO
   IF(DABS(GAMMA+ALPHA(J)+BETA(J)-TWO*PI)-TENM6)190,180,180
180 D(J)=IZ(J,4)*(DSQRT(ONE+A(J)*DCBJ-B(J)*DCAJ))/DSQRT(ONE-ZETA*ZETA)
190 CALL VPROD(V3,U1,U2)
   DO 200 I=1,3
   U3(I)=A(J)*U1(I)+B(J)*U2(I)+D(J)*V3(I)
   VJ(I)=BL(J)*U3(I)
   ITEMP=IZ(J,1)
   WRITE(6,1000)VJ(I),BL(J),U3(I),B(J)
   WRITE(6,1000)U1(I),D(J),U2(I),A(J),V3(I)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

200 CZ(J,I)=VJ(I)+CZ(ITEMP,I)
GO TO 250
C*   ***ATOM 4 UNDER 1-2-3 PLANE
210 CALL VEC(U1,CZ,IZ(J,1),IZ(J,3))
CALL VEC(U2,CZ,IZ(J,2),IZ(J,1))
ZETA=-(U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3))
CALL VPROD(V3,U1,U2)
V3MAG=DSQRT(V3(1)*V3(1)+V3(2)*V3(2)+V3(3)*V3(3))
A(J)=V3MAG*DCBJ/(ONE-ZETA*ZETA)
B(J)=DSQRT((ONE-DCAJ*DCAJ-A(J)*DCBJ*V3MAG)/(ONE-ZETA*ZETA))
IF(IZ(J,4)-2)220,230,220
220 B(J)=-B(J)
230 D(J)=B(J)*ZETA+DCAJ
DO 240 I=1,3
U3(I)=B(J)*U1(I)+D(J)*U2(I)+A(J)*V3(I)
VJ(I)=BL(J)*U3(I)
ITEMP=IZ(J,1)
240 CZ(J,I)=VJ(I)+CZ(ITEMP,I)
C*
C*
C   END OF PROCESS
250 CONTINUE
C   ELIMINATE DUMMY ATOMS ... THESE ARE CHARACTERIZED BY AN ATOMIC
C   NUMBER OF ZERO
260 NATOMS=0
DO 290 I=1,NZ
IF(IANZ(I))270,290,270
270 NATOMS=NATOMS+1
IAN(NATOMS)=IANZ(I)
DO 280 J=1,3
280 C(NATOMS,J)=CZ(I,J)
290 CONTINUE
RETURN
END
SUBROUTINE VEC(U,C,J,K)
C*
C   -----
C   QCPE VERSION
C   DECEMBER 1971
C   -----
C*
C*
C*   IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C*
C*   DIMENSION C(15,3),R(3),U(3)
C*
C*   DATA ZERO/0.0D0/
C*
C   CALCULA LA DISTANCIA INTERATOMICA J-K
R2=ZERO
DO 10 I=1,3
R(I)=C(J,I)-C(K,I)
10 R2=R2+R(I)*R(I)
R2=DSQRT(R2)
C   CALCULA LOS COSENOS DIRECTORES ENTRE LOS ATOMOS J-K
DO 20 I=1,3
20 U(I)=R(I)/R2
WRITE(6,100)U(1),U(2),U(3),R2
100 FORMAT(1H ,4(D15,8,2X))
RETURN
END
SUBROUTINE VPROD(VP,X,Y)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C*
C  -----
C  @CPE VERSION
C  DECEMBER 1971
C  -----
C*
C  VP=X CROSS Y
C*
C  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C*
C  DIMENSION VP(3),X(3),Y(3)
C*
C  VP(1)=X(2)*Y(3)-X(3)*Y(2)
C  VP(2)=X(3)*Y(1)-X(1)*Y(3)
C  VP(3)=X(1)*Y(2)-X(2)*Y(1)
C  WRITE(6,100)VP(1),VP(2),VP(3)
100 FORMAT(1H ,3(D15,8,2X))
C  RETURN
C  END
C  SUBROUTINE PRINTZ
C
C  ESCRITURA DE LA MATRIZ Z DE COORDENADAS INTERNA2
C
C  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C  COMMON NUMORB,IN,IOUT
C  COMMON/ZMAT/IANZ(15),IZ(15,4),BL(15),ALPHA(15),BETA(15),NZ,NZZ,
C  *IPAR(15,5),NIPAR(5),NPAR,NSTEP,XX(5),DX(5),NUM,IDUM
C
C  WRITE (IOUT,1020)
C  WRITE (IOUT,1030) IANZ(1)
C  IF(NZ,LE,1) GO TO 6
C  I1=1
C  WRITE (IOUT,1040) IANZ(2),IZ(2,1),BL(2),I1
C  IF(NZ,LE,2) GO TO 6
C  I1=I1+1
C  I2=NZ
C  WRITE (IOUT,1050) IANZ(3),IZ(3,1),BL(3),I1,IZ(3,2),ALPHA(3),I2
C  IF(NZ,LE,3) GO TO 6
C  I3=2*NZ-3
C  DO 4 I=4,NZ
C  I1=I1+1
C  I2=I2+1
C  I3=I3+1
C  4 WRITE (IOUT,1060) IANZ(I),IZ(I,1),BL(I),I1,IZ(I,2),ALPHA(I),I2,
C  *IZ(I,3),BETA(I),I3,IZ(I,4)
C  6 RETURN
1020 FORMAT(/30X,'Z MATRIX'/1X,'AN',3X,'Z1',4X,'BL',19X,'Z2',5X,'ALPHA'
C  *,15X,'Z3',4X,'BETA',17X,'Z4'/)
1030 FORMAT(I3)
1040 FORMAT(I3,I5,G14,7,'( ',I3,')  ')
1050 FORMAT(I3,I5,G14,7,'( ',I3,')  ',I5,G14,7,'( ',I3,')  ')
1060 FORMAT(I3,I5,G14,7,'( ',I3,')  ',I5,G14,7,'( ',I3,')  ',
C  *,I5,G14,7,'( ',I3,')  ',I5)
C  END
C
C  -NUMERO DE ATOMOS CUYAS COORDENADAS SE MINIMIZAN(CONSIDE-
C  RADOS EN EL ORDEN DE ENTRADA)
C  FORMATO 12
C
C*****
C  SE ELIGEN ESTOS DOS CRITERIOS DE CONVERGENCIA ,QUE HAN DE CUMLIRSE
C  SIMULTANEAMENTE:
C  1-LA VARIACION DE LA ENERGIA DE UN CICLO AL SIGUIENTE HA DE SER

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C      MENOR QUE TEPS=10**(IOPT(2)-1).EL VALOR STANDARD EN 10**(-5)
C      2-LA MAYOR DE LAS COMPONENTES DEL GRADIENTE HA DE SER MENOR QUE
C      DELT2P=10**(IOPT(1)).EL VALOR STANDARD ES 10**(-3).
C      IOPT(1)-->CONVERGENCIA PARA LA MINIMIZACION DE LA MAYOR DE LAS
C      COMPONENTES DEL GRADIENTE
C      IOPT(2)-->CONVERGENCIA EN LA ENERGIA PARA LA MINIMIZACION
C*****
C
C      LIMITACIONES
C      NUMERO MAXIMO DE NUCLEOS=10
C      NUMERO MAXIMO DE VARIABLES A MINIMIZAR=30
C      NUMERO MAXIMO DE CICLOS ITERATIVOS DURANTE LA MINIMIZACION=50
C
C      NOTA:SE USAN COORDENADAS CARTESIANAS PARA LAS VARIABLES Y SUS
C      GRADIENTES.
C      -----
C      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C      COMMON NUMORB,NR,NW,NT
C      COMMON/A/IWAY(10)
C      COMMON/ACELE/IACEL
C      COMMON/START/NRRNW
C      COMMON/C1/DNUCL(10,3),IZ(10),NATOMS
C      COMMON/C3/EPS,EPSENT,EPSEND,EPSCOE
C      COMMON/C4/TIPO
C      COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
C      COMMON/C11/DBORB(30,4),NNUCL(30),ITORB(30)
C      COMMON/VAL1/X(30),SIG(30),G(30),PK(30)
C      COMMON/PASSIT/E,EG(10,3)
C      COMMON/OPTS/IOPT(7)
C      COMMON/INDEX/ND,N,IKOUNT,ISET,NMAX
C      COMMON/IOFILE/IR,IW,IP,IS
C
C      SE INICIALIZAN LAS VARIABLES DEL PROGRAMA DE OPTIMIZACION
C      NMAX=NATOMS*3
C      IR=NR
C      IW=NW
C      IS=0
C      IP=0
C      WRITE(IW,1004)
C      LEEMOS LOS DATOS DE LAS COORDENADAS Y CARGA NUCLEAR
C      DO 1 I=1,NATOMS
C      1 READ(IR,101) IZ(I),DNUCL(I,1),DNUCL(I,2),DNUCL(I,3)
C      ESCRIBIMOS LOS DATOS DE LAS COORDENADAS INICIALES
C      WRITE(IW,1006)
C      WRITE(IW,1011)
C      DO 8 I=1,NATOMS
C      8 WRITE(IW,1008) I,IZ(I),(DNUCL(I,J),J=1,3)
C      LEEMOS LOS DATOS DE LOS ORBITALES
C      DO 2 I=1,NUMORB
C      2 READ(IR,1002) ITORB(I),NNUCL(I),(DBORB(I,J),J=1,4)
C      ESCRITURA DE LOS DATOS DE LOS ORBITALES
C      WRITE(IW,1012)
C      WRITE(IW,1005)
C      WRITE(IW,1010)
C      DO 9 I=1,NUMORB
C      9 WRITE(IW,1008) ITORB(I),NNUCL(I),(DBORB(I,J),J=1,4)
C      WRITE(IW,1012)
C      LEEMOS EL PARAMETRO QUE NOS INDICA SI SE TOMAN LOS VALORES STANDARD
C      DE LA MINIMIZACION O VAMOS A LEER OTROS VALORES
C      READ(IR,100) IROUTE
C      IF(IROUTE,EQ,0)GO TO 22
C      LECTURA DE LOS NUEVOS VALORES DE LOS PARAMETROS DE LA MINIMIZACION

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

      READ(IR,103)(IOPT(I),I=1,3)
      WRITE(IW,110)(IOPT(I),I=1,3)
      GO TO 23
C     SE TOMAN LOS VALORES STANDARD
22  WRITE(IW,111)
      DO 10 I=1,7
10  IOPT(I)=0
23  CONTINUE
C     LECTURA DEL NUMERO DE ATOMOS A VARIAR
      READ(IR,100)N
      WRITE(IW,104)N
C     CALCULO DEL NUMERO TOTAL DE COORDENADAS A VARIAR (N)
      N=N*3
C     ENTRADA DE LOS DATOS DE SCF
      CALL INSCF
C     LLAMADA AL PROCESO DE MINIMIZACION
      CALL OPTMO
C     ESCRITURA DE LOS VALORES FINALES
      K3=0
      DO 6 I=1,NATOMS
        J=0
        K1=K3+1
        K3=K1+2
        DO 5 K=K1,K3
          J=J+1
          EG(I,J)=G(K)
6     CONTINUE
C
      WRITE(IW,1007)
      WRITE(IW,1009)
      DO 7 I=1,NATOMS
7     WRITE(IW,1008)I,IZ(I),(DNUCL(I,J),J=1,3),(EG(I,J),J=1,3)
      RETURN
101  FORMAT(I5,3(D20,11))
100  FORMAT(I2)
103  FORMAT(3I5)
104  FORMAT(/9X,'SE VARIAN LOS ',I2,' PRIMEROS ATOMOS'//)
110  FORMAT(10X,'OPCIONES=',3I5/)
111  FORMAT(10X,'OPCIONES STANDARD'//)
1002 FORMAT(I2,1X,I2,3D15,8,D20,11)
1004 FORMAT(1H1,'DATOS INICIALES DE LA MINIMIZACION'////)
1005 FORMAT(/1H  ,9X,'COORDENADAS DE LOS ORBITALES ATOMICOS'//)
1006 FORMAT(/1H  ,9X,'COORDENADAS DE LOS NUCLEOS'//)
1007 FORMAT(/30X,'COORDENADAS(A,U.)',25X,'GRADIENTE(HARTREE/BOHR)'//)
1008 FORMAT(9X,2I5,3D15,7,5X,3D15,7)
1009 FORMAT(11X,'ATOMO',I  IZ ',6X,'X',13X,'Y',13X,'Z',20X,'X',13X,
* 'Y',13X,'Z'//)
1010 FORMAT(11X,'TIPO ',I,'ATOMO',6X,'X',13X,'Y',13X,'Z',15X,'EXPONENTE'//)
*)
1011 FORMAT(11X,'ATOMO',I  IZ ',6X,'X',13X,'Y',13X,'Z'//)
1012 FORMAT(1H  ,//)
      END
      SUBROUTINE OPTMO
C     CALCULO DE LAS MAGNITUDES EN EL PUNTO INICIAL PARA INICIAR EL PRO-
C     CESO
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMMON NUMORB,NR,NW,NT
      COMMON/C1/DNUCL(10,3),IZ(10),NATOMS
      COMMON/C3/EPS,ESENT,ESENO,EPSCO
      COMMON/C4/TIPO
      COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

COMMON/C11/DBORB(30,4),NNUCL(30),ITORB(30)
COMMON/VAL1/X(30),SIG(30),G(30),PK(30)
COMMON/PASSIT/E,EG(10,3)
COMMON/OPTS/IOPT(7)
COMMON/INDEX/ND,N,IKOUNT,ISET,NMAX
COMMON/IOFILE/IR,IW,IP,IS
COMMON/SUMEG/ENERG(50),GNORM(50),IK
DATA EFACT/627,4626/
IK=0
C INICIALIZAMOS EL CONTADOR DE LLAMADAS A LA FUNCION
IKOUNT=0
C CALCULO DE LA ENERGIA Y DEL GRADIENTE INICIAL
CALL VALUE
IK=IK+1
ENERG(IK)=E
GNORM(IK)=DSQRT(DOT(G,G,NMAX))
C OBTENCION DEL GRADIENTE EN FORMA DE MATRIZ
K3=0
DO 6 I=1,NATOMS
J=0
K1=K3+1
K3=K1+2
DO 5 K=K1,K3
J=J+1
5 EG(I,J)=G(K)
6 CONTINUE
C ESCRITURA DEL GRADIENTE INICIAL
WRITE(IW,2009)
WRITE(IW,2010)
DO 11 I=1,NATOMS
11 WRITE(IW,2002)I,(EG(I,J),J=1,3)
C ESCRITURA DE LA ENERGIA INICIAL EN A.U. Y CAL.
EKAL=E*EFACT
WRITE(IW,2003)E,EKAL
C ESCRITURA DE LA NORMA DEL GRADIENTE INICIAL
WRITE(IW,2004)GNORM(IK)
WRITE(IW,2006)
C PREPARACION DE LAS VARIABLES PARA INICIAR LA MINIMIZACION
FUNCT=E
I=0
DO 7 K=1,NATOMS
DO 8 J=1,3
I=I+1
8 X(I)=DNUCL(K,J)
7 CONTINUE
CC MINIMIZACION
CALL OPTIMU
C ESCRITURA DE LOS VALORES FINALES
WRITE(IW,2006)
C
EKAL=E*EFACT
WRITE(IW,2003)E,EKAL
GNF=DSQRT(DOT(G,G,NMAX))
WRITE(IW,2004)GNF
RETURN
2002 FORMAT(10X,I5,3D18.8)
2003 FORMAT(10X,'ENERGIA(A.U.)=',D15.8,3X,'ENERGIA(CAL.)=',D15.6/)
2004 FORMAT(10X,'NORMA DEL GRADIENTE=',5X,D15.6/)
2006 FORMAT(1H1)
2009 FORMAT(25X,'GRADIENTE(HARTREE/BOHR)')
2010 FORMAT(27X,'X',18X,'Y',18X,'Z')
END

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

SUBROUTINE OPTIMU
C CALCULO DE LA MATRIZ DEL HESIANO DESPUES DE CADA ITERACION
C
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  COMMON NUMORB,NR,NW,NT
  COMMON/C1/DNUCL(10,3),IZ(10),NATOMS
  COMMON/C3/EPS,EPSENT,EPSENO,EPSCOE
  COMMON/C4/TIPO
  COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
  COMMON/C11/DBORB(30,4),NNUCL(30),ITORB(30)
  COMMON/VAL1/X(30),SIG(30),G(30),PK(30)
  COMMON/PASSIT/E,EG(10,3)
  COMMON/OPTS/IOPT(7)
  COMMON/INDEX/ND,N,IKOUNT,ISET,NMAX
  COMMON/IOFILE/IR,IW,IPI,IS
  COMMON/SUMEG/ENERG(50),GGNORM(50),IIK
  COMMON/KONST/ALPHA,GNORM,CK,DELTP,DELT2P,NSD
  COMMON/MINOPT/          ZK(30),QK(30)
  COMMON/ARRAYS/S(30,30)
  WRITE(IW,1010)
C INTRODUCCION DE LOS VALORES STANDARD
  ALPHA=1,D0
  DELTP=1, D=08
  DELT2P=1, D=03
  WRITE(IW,1003)ALPHA
  IF(IOPT(1),NE,0)DELT2P=10,**(IOPT(1))
  FND=ALPHA
C INICIALIZAMOS EL CONTADOR DE ITERACIONES
  IIK=1
C..... COMIENZO DEL CICLO ITERATIVO .....
14 CONTINUE
  WRITE(IW,1007)IIK
C INICIALIZAMOS EL PARAMETRO ISET
C   ISET=1-->INICIALIZACION DEL PROCESO
C   ISET=2-->ALPHA DEMASIADO PEQUENA,SE REINICIA CON OTRO DE ALPHA
C   ISET=3-->SE TERMINA EL PROCESO
C           A) PORQUE HA CONVERGIDO LA ENERGIA Y EL GRADIENTE
C           B) PORQUE SE HAN SUPERADO LAS 50 ITERACIONES SIN
C           CONVERGER
  ISET=1
  IUP=0
C INICIALIZA LA MATRIZ DEL HESIANO A LA IDENTIDAD
  DO 15 J=1,N
  DO 16 I=1,N
  S(I,J)=0,D0
16 S(I,I)=1,0D0
15 CONTINUE
C CALCULO DE SIG
17 CALL MULTRC(S,G,SIG,N)
  ND=0
  CALL SMSL
  IUP=IUP+1
  IIK=IIK+1
C COMPROBACION DEL NUMERO DE ITERACIONES
  IF(IIK,LT,50)GO TO 19
  WRITE(IW,1005)
  ISET=3
C CONTINUA EL PROCESO SI EL NUMERO DE ITERACIONES ES MENOR QUE 50
19 CONTINUE
  ENERG(IIK)=E
  GGNORM(IIK)=GNORM
  IF(ND,EQ,1)IUP=1

```


SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C   ESCRIBIMOS LOS RESULTADOS DE LA MINIMIZACION EN EL MOMENTO
      WRITE(IW,1006)
      WRITE(IW,1004) IUP, IKOUNT, E , GNORM, ALPHA
      WRITE(IW,1008)
      I3=0
      DO 20 I=1, NATOMS
      I1=I3+1
      I3=I1+2
20  WRITE(IW,1009) I, IZ(I), (X(M), M=I1, I3), (G(M), M=I1, I3)
      ALPHA=FND
      WRITE(IW,1003) ALPHA
      IF(ISET, EQ, 2) GO TO 14
      IF(ISET, EQ, 3) GO TO 27
C   VARJAMOS LA MATRIZ DEL HESSIANO (SOLO SI ISET=1)
      DO 24 J=1, N
      DO 24 I=J, N
      S(I, J)=S(I, J)+ZK(I)*ZK(J)/CK
24  S(J, I)=S(I, J)
      GO TO 17
C   ..... FIN DEL CICLO ITERATIVO .....
27  WRITE(IW,1002)
      WRITE(IW,1011) IK
      WRITE(IW,1001) IKOUNT
      RETURN
1001 FORMAT(10X, 'NUMERO DE EVALUACIONES DE LA FUNCION=', I6/)
1002 FORMAT(10X, 'FIN DEL PROCESO DE MINIMIZACION: /)
1003 FORMAT(/10X, 'INICIALIZACION DE ALPHA' /10X, 'ALPHA=', D15.8/)
1004 FORMAT(10X, 2I5, 6X, 3D15.8/)
1005 FORMAT(///20X, 10(1H*), 'NO CONVERGE LA MINIMIZACION', 10(1H*)/)
1006 FORMAT(10X, 'UPDATE', 2X, 'IKOUNT', 3X, ' E ', 10X, 'GNORM', 8X, 'ALPHA'
*/)
1007 FORMAT(//6X, 'DATOS EN LA ITERACION ', I2/)
1008 FORMAT(/1H , 45X, 'COORDENADAS', 46X, 'GRADIENTE', /1H , 9X, 'ATOMO', 2X, '
* IZ , 12X, 'X', 16X, 'Y', 16X, 'Z', 26X, 'X', 16X, 'Y', 16X, 'Z, /)
1009 FORMAT(1H , 10X, I2, 4X, I2, 4X, 3(D15.8, 2X), 10X, 3(D15.8, 2X))
1010 FORMAT(/15X, 10(1H*), 'MINIMIZACION GEOMETRICA', 10(1H*))
1011 FORMAT(10X, 'NUMERO DE ITERACIONES REALIZADAS =', I2)
      END
      SUBROUTINE SMSL
C   CALCULO DE LA MATRIZ DEL HESSIANO DE UNA MANERA EFECTIVA
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
      COMMON NUMORB, NR, NW, NT
      COMMON/C1/DNUCL(10, 3), IZ(10), NATOMS
      COMMON/C2/ANOC(30), NPE
      COMMON/C3/EPS, EPSENT, EPSENO, EPSCOE
      COMMON/C4/TIPO
      COMMON/C5/NUMITE, NNN, IR, INR, INC, IW
      COMMON/C8/C(30, 30)
      COMMON/C11/DBORB(30, 4), NNUCL(30), ITORB(30)
      COMMON/C13/R(30, 30)
      COMMON/C19/VECTO(465)
      COMMON/VAL1/X(30), SIG(30), G(30), PK(30)
      COMMON/PASSIT/E, EG(10, 3)
      COMMON/OPTS/IOPT(7)
      COMMON/INDEX/ND, N, IKOUNT, ISET, NMAX
      COMMON/IOFILE/IR, IW, IPI, IS
      COMMON/KONST/ALPHA, GNORM, CK, DELTP, DELT2P, NSD
      COMMON/MINOPT/
      ZK(30), QK(30)
      COMMON/ARRAYS/S(30, 30)
      DIMENSION XINT(30), GNT(30)
C   OBTENCION DE LAS CONSTANTES Y LAS OPCIONES

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

DS=0,0
DELTPM=-DELTP
EPS=DELTP
ALPHL=1,D-2
TEPS=1,D-5
IF(IOPT(2),NE,0)TEPS=10,**(IOPT(2)-1)
C SE GUARDAN LAS CONSTANTES Y LOS VALORES INICIALES
FK=ALPHA
DO 10 I=1,N
XINT(I)=X(I)
10 GNT(I)=G(I)
GS1=DOT(G,SIG,N)
YINT=E
VK1=GS1
C INVESTIGA A LO LARGO DE LA DIRECCION SIG HASTA QUE ENCUENTRA UN VALOR
C DEL INCREMENTO DE LA ENERGIA ENTRE DOS CICLOS MENOR QUE TEPS.
11 YK=E
VK=VK1
DO 12 I=1,N
PK(I)=-FK*SIG(I)
X(I)=XINT(I)+PK(I)
12 CONTINUE
CALL VALUE
WRITE(IW,1003)IKOUNT
I3=0
DO 21 I=1,NATOMS
I1=I3+1
I3=I1+2
21 WRITE(IW,1000)I,(X(M),M=I1,I3)
WRITE(IW,1004)E
YK1=E
VK1=DOT(G,SIG,N)
GNORM=DSQRT(DOT(G,G,N))
TEST=EPS*VK*FK-TEPS
DIFF=YK-YK1
IF(DIFF,GE,TEST)GO TO 14
DS=0,
C.....
FK=FK/2,
IF(FK,GE,ALPHL)GO TO 13
C EL VALOR DE ALPHA(=FK) SE HACE MENOR QUE EL LIMITE ALPHL
C SE REINICIA EL HESSIANO SOBRE EL ULTIMO VALOR DE LAS COORDENADAS
WRITE(IW,1001)
ISET=2
ND=1
ALPHA=FK
WRITE(IW,1002)
GO TO 19
C.....
13 E =YINT
VK1=GS1
GO TO 11
C FIN DE LA BUSQUEDA DIRECCIONAL
C
C HA CONVERGIDO LA ENERGIA, AHORA COMPRUEBA EL GRADIENTE
14 CONTINUE
BIGG=0,0
DO 15 I=1,N
AG=DABS(G(I))
IF(AG,GT,BIGG)BIGG=AG
15 CONTINUE
IF(BIGG,LE,DELT2P)GO TO 20

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

C NO HA CONVERGIDO EL GRADIENTE
  ALPHA=FK
  DO 16 I=1,N
16 QK(I)=G(I)-GNT(I)
  CALL MULTRC(S,QK,ZK,N)
  DO 17 I=1,N
17 ZK(I)=PK(I)-ZK(I)
  CK=DOT(QK,ZK,N)
  ZTG=DOT(ZK,GNT,N)
  ZTGK=ZTG/CK
  ZK2=DOT(ZK,ZK,N)
  DZK=DELT2P*ZK2
  ACK=DABS(CK)
  IF(ACK,GE,DZK,AND,ZTGK,LE,DELTPM)GO TO 19
  ISET=2
19 CONTINUE
  RETURN
C HA CONVEGIDIDO EL GRADIENTE
20 ISET=3
  ALPHA=FK
  RETURN
1000 FORMAT(1H ,15X,15,5X,3(D15,8,2X))
1001 FORMAT(10X,20(1H*),' ALPHA DEMASIADO PEQUENO',20(1H*)//)
1002 FORMAT(10X,20(1H*),'REINICIALIZACION DE LA MATRIZ DEL HESIANO',10(
  *1H*)//)
1003 FORMAT(//1H ,15X,'IKOUNT =',15/1H ,15X,'ATOMO',12X,'X',16X,'Y',16X
  *,'Z'//)
1004 FORMAT(1H ,15X,'ENERGIA =',D15,8//)
  END
  SUBROUTINE MULTRC(A,X,Y,N)
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  DIMENSION A(30,30),Y(30),X(30)
  DO 20 I=1,N
  S=0,DO
  DO 10 J=1,N
10 S=S+A(I,J)*X(J)
20 Y(I)=S
  RETURN
  END
  FUNCTION DOT(X,Y,N)
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  DIMENSION X(30),Y(30)
  DOT=0,DO
  DO 10 J=1,N
10 DOT=DOT+X(I)*Y(I)
  RETURN
  END
  SUBROUTINE VALUE
C LLAMADA A LAS SUBRUTINAS PARA EL CALCULO DE LA ENERGIA POTENCIAL
C Y DEL GRADIENTE DE LA FUNCION EN EL PUNTO,
C EN E SE GUARDA EL VALOR DE LA FUNCION EN EL PUNTO
C EN ET EL RESULTADO DE LAS SUCESIVAS LLAMADAS A LA FUNCION
C
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  COMMON NUMORB,NR,NW,NT
  COMMON/C1/DNUCL(10,3),IZ(10),NATOMS
  COMMON/C2/ANOC(30),NPE
  COMMON/C3/EPS,EPSENT,EPSEN0,EPSCOE
  COMMON/C4/TIPO
  COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
  COMMON/C8/C(30,30)
  COMMON/C11/DBORB(30,4),NNUCL(30),ITORB(30)

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```

COMMON/C13/R(30,30)
COMMON/C19/VECTO(465)
COMMON/VAL1/X(30),SIG(30),G(30),PK(30)
COMMON/PASS1T/E,EG(10,3)
COMMON/INDEX/ND,N,IKOUNT,ISSET,NMAX
COMMON/ENERGY/ET
C
  IF(IKOUNT,EQ,0)GO TO 12
C  OBTENCION DE LA NUEVA MATRIZ DE COORDENADAS CARTESIANAS
  DO 10 K=1,NMAX
    I=((K-1)/3)+1
    J=K-3*(I-1)
  10 DNUCL(I,J)=X(K)
  12 CONTINUE
C  OBTENCION DE LA FUNCION
  CALL SCF
  E=ET
C  CALCULAMOS EL GRADIENTE
  CALL GRAD
C  INCREMENTAMOS EL CONTADOR DE LLAMADAS
  IKOUNT=IKOUNT+1
  RETURN
  END
  SUBROUTINE GRAD
C  CALCULO DEL GRADIENTE DE LA FUNCION
C
C  ES NECESARIO CONOCER
C  LA ENERGIA EN EL PUNTO CUYO GRADIENTE SE VA A CALCULAR(ENERG)
C  LAS COORDENADAS DEL PUNTO(DNUCL(I,J))
C  EL INCREMENTO DIFERENCIAL PARA EL GRADIENTE(RINCR)
C  EL NUMERO DE VARIABLES A VARIAR (NMAX)
C
  IMPLICIT REAL *8(A-H,O-Z)
  COMMON NUMORB,NR,NW,NT
  COMMON/C1/DNUCL(10,3),IZ(10),NATOMS
  COMMON/C2/ANOC(30),NPE
  COMMON/C3/EPS,EPSENT,EPSENO,EPSCOE
  COMMON/C4/TIPO
  COMMON/C5/NUMITE,NNN,IR,INR,INC,IW
  COMMON/C8/C(30,30)
  COMMON/C11/DBORB(30,4),NNUCL(30),ITORB(30)
  COMMON/C13/R(30,30)
  COMMON/C19/VECTO(465)
  COMMON/VAL1/X(30),SIG(30),G(30),PK(30)
  COMMON/INDEX/ND,N,IKOUNT,ISSET,NMAX
  COMMON/ENERGY/E
  DIMENSION C(10,3)
C
C  GUARDAMOS EL VALOR DE LA FUNCION EN EL PUNTO COMO REFERENCIA
  ENERG=E
C  INICIALIZAMOS A CERO EL GRADIENTE
  DO 10 I=1,NMAX
  10 G(I)=0,DO
C  SE GUARDAN LAS COORDENADAS DEL PUNTO EN LA MATRIZ C
  DO 11 I=1,NATOMS
  DO 12 J=1,3
  12 C(I,J)=DNUCL(I,J)
  11 CONTINUE
C  IMPONEMOS EL VALOR DE RINCR
  RINCR=0,0005
C*
C*  CALCULAMOS EL GRADIENTE PARA CADA COORDENADA A VARIAR

```

SOURCE STATEMENT (JNVINIM)

```
C* DO 1 NCOOR=1,N
C  CALCULO DE LOS INDICES I,J QUE SE CORRESPONDEN CON NCOOR
    I=((NCOOR-1)/3)+1
    J=NCOOR-3*(I-1)
C  INTRODUCIMOS EN LA COORDENADA NMAX EL VALOR R+RINCR
    DNUCL(I,J)=DNUCL(I,J)+RINCR
C  CALCULO DE LA FUNCION
    CALL SCF
C  CALCULO DEL GRADIENTE PARA ESA COORDENADA
    G(NCOOR)=(E-ENERG)/RINCR
C  RESTITUIAMOS LOS VALORES DE LAS COORDENADAS
    DNUCL(I,J)=C(I,J)
1  CONTINUE
    RETURN
    END
    SUBROUTINE SCFJ
    IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
    COMMON/C1/DNUCL(10,3),IZ(10),NUMNUC
    COMMON/ENERGY/E
C
    X=DNUCL(1,1)
    Y=DNUCL(1,2)
    Z=DNUCL(1,3)
    E=X**2+Y**2+Z**2
    RETURN
    END
```

Apéndice II.

En este apéndice, se incluyen las tablas de los orbitales adaptados a la simetría, para la clasificación por especies de simetría de los MO obtenidos en los cálculos. Se respeta la numeración dada en la Tabla IV.1 para los átomos de hidrógeno. Indiquemos para finalizar, que en la clasificación de los MO obtenidos de los cálculos MINDO, la asignación espacial que efectúa automáticamente el programa es la siguiente:

- Primer átomo en el origen de coordenadas
- Segundo átomo sobre el sentido positivo del eje x
- Todos los demás se pueden situar a partir de esta orientación.

En nuestro caso, se ha respetado la convención de ejes en Teoría de Simetría.

D_{3h}		C_{3v}
a_1'	$2s$ $s_2 + s_3 + s_4$ $s_1 + s_5$	a_1
a_2''	$2p_z$ $s_1 - s_5$	
e_x'	$2p_x$ $s_4 - s_3$	e_x
e_y'	$2p_y$ $2s_2 - s_3 - s_4$	e_y

C_{4v}		$C_{2v}(II)$
a_1	$2s$ $s_2 + s_3 + s_4 + s_5$ $s_1 + s_3$ s_1 $s_4 + s_5$ $2p_z$	a_1
b_1	$s_2 + s_3 - s_4 - s_5$	
e_x	$2p_x$ $s_2 - s_3$	b_1
e_y	$2p_y$ $s_4 - s_5$	b_2

$C_{2v}(I)$

	$2s$
a_1	$s_2 + s_3$
	$s_4 + s_5$
	s_1
	$2p_z$
<hr/>	
b_1	$s_2 - s_3$
	$s_4 - s_5$
	$2p_x$
<hr/>	
b_2	$2p_y$
<hr/>	

$C_s(I)$

	$2s$
a'	s_1
	s_2
	s_3
	$s_4 + s_5$
	$2p_x$
	$2p_y$
<hr/>	
a''	$2p_z$
	$s_4 - s_5$
<hr/>	