

**f 電子化合物における
分子軌道法に関する研究**

1995年3月

**動力炉・核燃料開発事業団
東海事業所**

複製又はこの資料の入手については、下記にお問い合わせ下さい。

〒319-11 茨城県那珂郡東海村大字村松4-33

動力炉・核燃料開発事業団

東海事業所 技術開発推進部・技術管理室

Enquires about copyright and reproduction should be addressed to: Technology Management Section, Tokai Works, Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation, 4-33 O-aza-Muramatsu, Tokai-mura, Naka, Ibaraki-ken, 319-11, Japan

動力炉・核燃料開発事業団 (Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation)

f電子化合物における分子軌道法に関する研究

足立裕彦*

要 旨

最近科学技術の各分野で計算機を有効に利用しようという気運が高まっている。我々は物質の電子状態を計算するDV-X α 分子軌道法を開発し、いろいろな分野において応用を試み、その有効性を示してきた。

本研究ではこの方法をウランやプルトニウムなどを含むf電子系元素を含む化合物の電子状態を正確に計算し、核燃料サイクルや廃棄物処理など原子力に関する科学技術の開発に有効に利用することを目的としている。

本報告ではまず当面の研究目標を述べ、X α 法およびDV-X α 分子軌道法について説明する。さらに現在どのような研究に用いられているのか簡単に述べ、材料設計および電子分光学への応用について紹介する。さらに現在まで行ってきたウラン化合物などの電子状態計算についても報告する。

本報告は、足立裕彦が動力炉・核燃料開発事業団の委託により実施した研究の成果である。

契約番号：060 D0146

事業団担当部課室および担当者：核燃料技術開発部 先端技術開発室 小田好博

* 京都大学大学院工学研究科材料工学教室

Molecular Orbital Study on f-Electron Compound

Hirohiko Adachi*

Abstract

Recent development of the computer technology is considered to be very efficient for various field of science and technology. We have developed discrete variational (DV) $X\alpha$ molecular orbital method which make the first-principles calculation of electronic states of matters, and have applied it to many problems in various fields, demonstrating its strong efficiency.

Main purpose of the present study is the effective application of DV- $X\alpha$ method to various sciences and technologies concerning the atomic energy, such as nuclear fuel and waste matters technologies.

In the present report, we first describe the current interest and explain $X\alpha$ and DV- $X\alpha$ molecular orbital method. Next, we briefly mention how useful the DV- $X\alpha$ method in various fields, and introduce some applications to the studies of materials design and electronic spectroscopies. Finally we shortly report the studies for electronic state calculations of uranium compounds we have made so far.

Work performed by Hirohiko Adachi under contract with Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation

PNC Liaison : Nuclear Fuel Technology Development Division

* Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University

目 次

1.はじめに	1
2.X α 法	1
3. DV-X α 分子軌道法	2
4. DV-X α 法の応用	3
5.合金設計への応用	4
6.電子分光への応用	5
6.1 光電子スペクトル	6
6.2 X線吸収スペクトル	6
7.相対論 DV-X α 法によるウラン化合物の電子状態計算	7
8.おわりに	7

図 . 表 目 次

図 1	クラスターモデル.....	1 0
図 2	Ni ₃ Al 相のモデルクラスターの価電子レベル構造.....	1 0
図 3	合金元素 M の d レベルエネルギーと電気陰性度との関係.....	1 1
図 4	三元系合金の等温状態図.....	1 1
図 5	実用合金の M _d 値のプロット.....	1 2
図 6	H ₂ S 分子の軌道エネルギーとイオン化エネルギー.....	1 3
図 7	SF ₆ 分子の軌道エネルギーとイオン化エネルギー.....	1 4
図 8	SF ₆ 分子の S-L _{2,3} XANES スペクトルと理論スペクトル.....	1 5
図 9	SF ₆ 分子の F-K XANES スペクトルと理論スペクトル.....	1 5
図 1 0	UF ₆ 分子の軌道準位。非相対論計算と相対論計算との比較.....	1 6
図 1 1	UF ₆ 分子の UPS スペクトルの計算と実験との比較.....	1 6
表 1	Ni 基合金のパラメーター M _d と結合次数.....	1 6

1. はじめに

原子力エネルギーに関する科学技術は開発の時代が過ぎ原子力エネルギーの安定供給の時代に入っていると考えられる。しかし原子力利用において最も優先されるべき安全性や核燃料サイクル、廃棄物処理などの問題については未だ多くの解決されていない課題を残したままである。原子力の科学技術においては、一般に放射能の極めて強い物質を扱うので、研究開発に膨大な予算と労力が必要であり、これが技術開発の進展を妨げている。一方最近のコンピューターの技術の進歩は目を見張るものがあり、現代の科学技術へ応用が急速に拡大しつつある。コンピューター技術は極めて汎用性の高いものであるので、この有効利用は予算の軽減に大変役に立つ。特に研究・技術開発に膨大な費用を必要とする原子力分野では極めて有効な手法であると考えられる。

最近材料科学の分野で、理論的手法を取り入れて研究を進めようという気運が高まっている。我々も物質の電子状態を分子軌道法で計算し、材料科学への応用を試みている。分子軌道法という理論的手段は、従来簡単な有機化合物の電子状態を計算し、その化学反応や有機物の物性の研究に用いられてきた。しかし一般に物質のミクロな構造や物性・機能そして変化などのほとんどが物質中の電子状態及びその安定性や変化に由来するので、従来の分子軌道法よりもっと一般的に使える方法の開発と応用は、材料科学において大変魅力あるテーマと考えている。

20年ほど前、discrete variational(DV) $X\alpha$ 法¹⁾という分子軌道計算方法を開発した。この方法は周期表のどの元素でも簡便に扱うことができ、材料科学の研究には大変有効と考えられる。この方法は元来化学物質の電子状態を計算する方法なので、金属、半導体やイオン化合物また固体、液体、気体などの存在状態にもかぎらず適用できると考えられる。現在それらの基礎的な理論データを積み重ねていくことを試みており、近い将来実用的な材料科学に使える理論を作り上げることを目指している。

2. $X\alpha$ 法

$X\alpha$ 法は1951年にスレーター²⁾によって提案された $X\alpha$ ポテンシャルを用いる電子状態の計算法である。非経験的ハートリー・フォック法に比べ、2桁も3桁も計算時間を短縮できるのが特徴である。この $X\alpha$ 法(あるいはハートリー・フォック・スレーター法とも呼ばれる)は1963年にハーマンとスキルマン³⁾によって原子構造の計算に応用され、俄然注目されることになった。そこで得られた原子のポテンシャルや波動関数は、固体の電子構造の計算などいろいろな方面で用いられている。

1966年にはK. H. ジョンソン⁴⁾がmultiple scattering(MS) $X\alpha$ 分子軌道法を開発した。それまでは原子番号の大きな元素を含む分子やクラスターの計算は不可能に近かったが、MS- $X\alpha$ 法を使えば小さな有機分子以外の系でも第一原理の電子状態の計

算ができることが示され、分子軌道論の応用の飛躍的な拡張が始まった。これとは別に我々はDV-X α 分子軌道法を開発し、いろいろな問題に応用を試みている。^{1,5)} DV-X α 法は上に述べたように様々な分野への応用も試みはじめられており、従来分子軌道法の適用があまり考えられなかったような問題への応用という意味でも興味もたれている。

3. DV-X α 分子軌道法

DV-X α 法では交換ポテンシャルの項にスレーターの提案した

$$V_{XC\uparrow}(1) = -3\alpha \left\{ \frac{3}{4\pi} \rho_{\uparrow}(1) \right\}^{1/3} \quad (1)$$

を用いる。ここで \uparrow は上向きスピンを意味し、下向きスピンに対しても同様な式で計算される。 ρ_{\uparrow} は上向きスピンをもち電子の密度である。 α はパラメーターであるが、0.7などの固定した値を使うので、経験的に決めなければならないパラメーターはない。X α ポテンシャルは(1)式のように局所スピン密度 ρ_{\uparrow} の1/3乗に比例するとし計算されるので、きわめて簡単に求めることが出来るわけである。

次に多中心積分の方法であるが、分子軌道をLCAOの形で

$$\phi(1) = \sum_i C_{i\ell} \chi_i(1) \quad (2)$$

のように表すと、永年方程式のHおよびSの行列要素をDV-X α 法では

$$H_{ij} = \sum_k^N \omega(\mathbf{r}_k) \chi_i(\mathbf{r}_k) H \chi_j(\mathbf{r}_k) \quad (3)$$

$$S_{ij} = \sum_k^N \omega(\mathbf{r}_k) \chi_i(\mathbf{r}_k) \chi_j(\mathbf{r}_k)$$

のように数値積分で置き換える。ここで \mathbf{r}_k は空間にランダムにばらまかれたサンプル点で、 $\omega(\mathbf{r}_k)$ はその点の重みあるいは体積素片である。この数値積分法は簡便であり、被積分関数に数学的な制約がないので、(3)式の計算が容易になることにともなっている。いろいろな長所がある。まず(2)式の基底関数 χ_i として数値的な原子軌道関数そのものを使うことが出来る。数値的原子軌道関数は分子中の各原子のポテンシャルに対するシュレディンガー方程式を数値的に解くことによって容易に求めることが出来る。この計算はX α ポテンシャルを用いると、周期表の全ての原子について短時間で実行でき、これをそのまま分子軌道の基底関数として使うので、どのような元素が含まれていても同じ手続きで、同じ精度の分子軌道計算が出来る。当然どのような元素に対しても、原子軌道のパラメーターを選んだりする必要は全くない。

マリケンの電子密度解析法を用いると電子密度の解析ができる。

$$n = \sum_{\ell} f_{\ell} \int |\phi_{\ell}(r)|^2 dr = \sum_{i,j} q_{ij}$$

ここで n は全電子数、 f_{ℓ} は分子軌道 ℓ の占有数である。この式は

$$q_{ij} = \sum_{\ell} f_{\ell} C_{i\ell} C_{j\ell} S_{ij}, \quad q_i = \sum_j q_{ij} \quad (4)$$

と書くことが出来る。 q_i は orbital population と呼ばれ、各原子軌道に振り分けられる電子数と考えることが出来る。 q_{ij} は overlap population と呼ばれ、原子軌道 i と j とが重なり合った領域に分布する電子密度と考えることが出来、共有結合の尺度とすることが出来る。

4. DV- $X\alpha$ 法の応用

まず DV- $X\alpha$ 法では、周期表の全元素を対象としていて、重い元素でも軽元素と同様に取り扱うことが出来る。金属、半導体あるいは無機化合物などの固体もクラスターモデルでそれらの電子状態の計算が可能である。現在まで DV- $X\alpha$ 法を利用して行った計算例について簡単に紹介したい。

(a) 金属：数個から数十個の金属原子を含む金属クラスターの計算が行われている。金属内部や表面の局所電子状態は多くの分野で重要な研究課題である。金属元素の組合せや組成・構造を設定してモデル・クラスターの計算を行うことにより、種々の合金や金属間化合物の電子構造¹⁾を近似的に得ることが出来る。また金属中不純物や格子欠陥近傍の電子状態⁶⁾は金属材料の最も基礎的な問題であり、その物性を評価する上で重要になる。 $X\alpha$ 法ではスピン分極した場合の計算⁷⁾も容易に行え、磁気的性質の議論も可能である。

(b) 半導体：シリコンや GaAs などの化合物半導体の電子構造およびその不純物効果についてクラスターモデルを用いた計算⁸⁾が行われている。化合物半導体では GaAs 中の Zn の不純物効果についての計算例⁹⁾があり、Zn の異常拡散の原因が明らかにされた。

(c) 無機化合物：種々の金属化合物などのセラミックス、ガラスなどについてのクラスターモデルの計算¹⁰⁾が行われている。また遷移金属錯体についても種々の計算例があり、結合性の議論や結晶パラメーターの計算に用いられている。さらに溶液中の酸素酸イオンや水和イオンの計算などがなされ、溶液化学への応用¹¹⁾が始められている。

(d) 電子分光：ESCA、X線およびUVの吸収及び発光スペクトルの理論解析¹²⁾に用いられている。

(e) 表面：金属および化合物の表面電子状態や化学吸着の研究¹³⁾に用いられ、また固体表面上での結晶成長の基礎研究に用いられた例もある。

(f) 原子過程：原子衝突、高密度プラズマ、多電子励起などの原子過程の研究や μ -原子を含む分子軌道計算の例がある。

(g) 材料設計：合金や金属間化合物のクラスターモデルの計算¹⁴⁾を行うと超耐熱合金、チタン合金、アルミニウム合金など種々の特殊合金の特性を予測できることがわかった。また実用合金中の合金元素の固溶限界、析出相、機械的強度や熱的安定性、変態温度、拡散や電気抵抗、そして耐食性など多くの特性が予測でき、実際に高性能の合金の設計¹⁵⁾に成功している。

5. 合金設計への応用

われわれは DV-X α 法を金属材料の電子状態の研究に応用しているが、合金や金属間化合物のクラスターモデルの計算から得られた結果が、実用的な金属材料の設計のきわめて有用な指針になることを見いだした。

合金はある金属に別の金属を添加して得られるが、その合金効果は添加元素の近傍の局所的な電子状態の変化が反映されたものと考えられる。従って合金の電子状態は、合金元素の原子の周りに母体の金属原子を配置させたような簡単なクラスターでも、有効に近似できると考えられる。図1は、われわれがよく用いるfcc, bcc, hcp が母金属の合金のクラスターモデルである。母金属原子Xのクラスターの中心原子を合金元素Mで置き換えたものである。元々金属結晶の電子状態は簡単なクラスターでもそこそこ近似できるものである。

実用合金は何種類もの元素をいろいろな組成比で添加して作られている。このような複雑な合金の電子状態を正確に知ることは不可能である。そこで合金の特性を左右すると考えられるパラメーターを選ぶことにする。合金クラスターの分子軌道計算から得られる最も基本的なものは合金元素近傍に局在した軌道レベルである。ここでは主として遷移金属を取り扱うのでd軌道レベルとし、Md と書くことにする。さらに合金元素と周りの母金属原子との間の化学結合が重要と考えられるので、それらの間の結合次数をもう一つのパラメーターとして、Bo と書くことにする。合金は何種類かの元素の組合せで出来ているので、i番目元素の組成比を x_i 、Md, Bo 値を $(Md)_i, (Bo)_i$ と書き、それらの組成平均

$$Bo = \sum_i x_i (Bo)_i \quad (5)$$

$$Md = \sum_i x_i (Md)_i \quad (6)$$

をとってその合金のパラメーターとする。

つぎに合金クラスターのDV-X α 分子軌道計算を行って、どの様に合金設計の指針にしていくかを、具体的な例を挙げて説明する。

ジェットエンジンやガスタービンの構造材料として使われる Ni基超耐熱合金は Ni

母相 (γ 相) に析出する Ni_3Al 相 (γ' 相) により強化されている。実用合金は特性を改善するため、さらに何種類かの添加元素が加えられる。この問題を想定して、図 1 (a) に示す構造の合金クラスター MNi_{12}Al について、添加元素 M を周期表にしたがって変えながら電子構造の計算を行ってみると、図 2 に示すレベル構造が得られる。このクラスター計算から Md (図 2 の $16e_g$ と $14t_{2g}$) や Bo などのパラメーターが得られる。これらの値を表 1 にまとめておく。ただし表中の Md の値は平均値である。まず注目したいのは Md である。Md の値を合金元素の電気陰性度に対してプロットすると図 3 のようになる。この図から Md の値が分かっていると合金元素の固溶性の予測が出来ることが分かる。すなわち Md 値の高い Hf, Zr は粒界へ、中間の Md 値を示す Ti, Nb, Ta は γ' 相へ、その他は母相の γ 相へ分配される。添加する合金元素の量がある臨界値を越えると、 σ 相などの有害脆化相が析出するのでこれを予測する必要がある。そこで既に分かっている三元状態図を使って、 σ 相の出現の予測が出来るか確かめてみる。図 4 は 2 種類の状態図を示す。実際の合金では元素と組成が分かっているので、表 1 の値と (6) 式から合金中の平均の Md 値が決める。今平均の Md 値が 0.925 を与える組成をプロットすると 1 点鎖線で示す直線になる。この線は σ 相出現の境界線を与えていることが分かる。同様の方法で σ 相だけでなく μ 、 γ' 、 β (NiAl 相) などの相境界が予測できる。さて実用超耐熱合金の場合はどうであろうか。図 5 は実用合金の場合について合金の平均 Md 値をプロットしたものである。図 (b) には Co 基合金の場合も示してある。この図から分かるように、実用合金でも Md 値から脆化相が現れるかどうかを予測することが出来る。

実際にはこのような第一原理の計算からは、もっと基礎的な合金の電子状態についての考察が可能であることはいうまでもないことである。しかし多種多様な材料設計を行っていく上においては、もっと大胆な理論の展開と活用が必要ではないかと考えられその一例を紹介した。

6. 電子分光への応用

光電子分光や種々の X 線分光法は物質同定の有力な手段であるが、最近の技術的な進歩と発展によって注目されている。しかしこれらをより有効に利用するためには、正しい理論的解析が不可欠になってきている。従来から分光スペクトルの解析にいろいろな理論計算法が用いられているが、DV- $X\alpha$ 分子軌道法は実験スペクトルをよく再現できる方法として知られている¹²⁾。ここでは光電子スペクトルや X 線の吸収スペクトルの理論計算と解釈におけるいくつかの問題を取り上げ議論する。

6. 1 光電子スペクトル

通常DV-X α 法で分子の電子状態を計算する場合、まず基底状態についての計算を行う。しかしX α 法では基底状態の軌道エネルギーは軌道電子の結合エネルギーの近似値ではない。スレーターの遷移状態法では、軌道電子を半分取り除いた計算を行うが、この計算で得られた軌道エネルギーはイオン化に伴う軌道緩和を取り入れたイオン化エネルギーを与える²⁾。イオン化や電子励起の過程で一方のスピンの軌道に取り残されるので、閉殻分子の場合でもスピン分極が起こる。すなわち、スピン分極を考慮しない計算では正確な計算が行えない。さらに内殻電子を扱う場合は相対論的効果が大きくなるので、結合エネルギーの絶対値を議論する場合は相対論の計算が必要になる。DV-X α 法で電子の結合エネルギーを計算する場合は以上のような考察が必要と思われる。そこで後のX線吸収スペクトルのところでも取り上げる硫黄の化合物について、1)分子の基底状態、2)スレーターの遷移状態、3)遷移に伴うスピン分極の効果を調べるためspin-polarized DV-X α 法の計算、さらに4)相対論のDirac-Slater方程式によるrelativistic DV-X α 法¹⁶⁾を用いて計算を行い、各々の方法で得られた軌道エネルギーを光電子分光の実験で得られた軌道電子の結合エネルギーと比較し検討した。

図6はH₂S分子について上述の1)-4)の方法で計算された軌道エネルギーを示す。遷移状態の計算(図のTSで示す)では基底状態(GS)に比べ、軌道緩和の効果を反映して軌道エネルギーが、価電子領域で4.5 eV、内殻の2s,2p軌道で15 eV程低下する。軌道エネルギーの値はESCAの実験値¹⁷⁾とよく一致するようになることが分かる。この計算はスピン分極を考慮していない計算で(non)、スピン密度を過大評価しているため、交換ポテンシャルをやや大きく見積っている。正しいスピン密度を与えるspin-polarizedの計算(spin)を行うと軌道エネルギーはやや上昇する。次に相対論の分子軌道計算(rel)を行うと相対論的効果が取り入れられるが、この効果はレベルシフトとs軌道以外ではスピン-軌道カップリングによるレベルの分裂として現れる。この計算を行うとS 2p軌道のレベル分裂までよく再現できることが分かる。この計算にスピン分極の効果を取り入れるとDV-X α 法による最良の結果(thoer.)が得られる。図7にはSF₆分子について同様の計算を行った結果を示した。計算結果は価電子レベル、内殻レベルとも実験結果をよく再現しているといえる。

6. 2 X線吸収スペクトル¹⁸⁾

X線吸収スペクトルでは、多電子励起を除くと、次の4種類の状態に電子が励起されてピークが現れる。低いエネルギーで出現するものから順に、1) 価電子状態、2) 分子Rydberg状態、3) 形状共鳴状態、4) 自由電子状態である。

上記4種類の励起状態は、波動関数が著しく異なるため、それぞれ、異なる計算法

やテクニックを用いることが多いが、DV- $X\alpha$ では 1),2),3) の状態を同じ手法で取り扱える。理論X線吸収スペクトルを求める方法の基本は、エネルギーは遷移状態法を用い、光吸収断面積は双極子遷移の振動子強度から算出している¹⁹⁾。

形状共鳴ピークは、多くの分子に見られ、固体では、XANES(X-ray Absorption Near-Edge Structure)に相当する。SF₆分子の硫黄のKおよびL吸収スペクトルに、イオン化エネルギー前後で著しく強く、シャープなピークが発見されて研究が始まった。分子軌道法計算によって求めた空軌道に対応づけることは、早くから行われ²⁰⁾、定性的にスペクトルを説明できたが、どういう理由で強いピークが現れるか明らかにされなかった。

筆者らはDV- $X\alpha$ を用いて、SF₆の理論スペクトルを求め、実験スペクトルとよく一致することを明らかにした。図8と図9に、SF₆分子の硫黄のL_{II,III}およびフッ素のK吸収のスペクトルを示す。いずれも、DV- $X\alpha$ より求めた理論スペクトルは、エネルギーおよび光吸収断面積に関して、実験スペクトル²¹⁾とよく一致している。図を省略したが、硫黄のK吸収スペクトルも同様によく一致している。

この研究は最近、種々の半導体やセラミックスなどの無機化合物の状態分析²²⁾に極めて有効であることが示されその応用が拡がりつつある。

7. 相対論DV- $X\alpha$ 法によるウラン化合物の電子状態計算

ウランやプルトニウムなどのアクチニド元素を含む物質の電子状態計算は、相対論の効果が非常に大きくなり、通常のシュレディンガー方程式を解く電子状態計算法では用を足さない。我々はディラック方程式を直接計算する相対論DV- $X\alpha$ 法のプログラムを開発した^{22,23)}。この相対論DV- $X\alpha$ 法を用いてUF₆の電子状態を計算した²⁴⁾。図10には価電子帯のレベル構造を非相対論計算の結果と比較した。また図11には価電子帯の光電子スペクトルの理論計算結果を実験のスペクトルと比較して示したが、極めてよい一致が見られる。UF₆については化学結合性²⁵⁾や吸収スペクトル²⁶⁾に現われる相対論効果についての研究を行ってきた。またUV光励起プロセスへの応用の試みなどもなされている²⁷⁾。

さらに最近UF₄²⁸⁾電子状態計算や溶液中の硝酸ウラニル²⁹⁾の研究にも応用され、実際の核燃料サイクルの技術の開発に直接結びつく研究が開始されている。

8. おわりに

DV- $X\alpha$ 分子軌道法とその応用例として合金設計に関する研究およびX線分光の理論的研究に極めて有効な手段になり得ることを紹介した。また相対論DV- $X\alpha$ 法を用いたウラン化合物の電子状態の計算についても述べ、原子力研究への応用が可能であるこ

とを示した。今後さらに材料研究の中でまだ未解決の問題で電子論の理論研究が役に立つ領域が拡がりつつあるように思われる。

参考文献

- 1) 足立裕彦、「量子材料化学入門—DV-X α 法からのアプローチ」、三共出版、1991。
- 2) J. C. Slater, Phys. Rev., 81 (1951)385. J. C. Slater, "Quantum Theory of Molecules and Solids", vol.4, McGraw-Hill, 1974.
- 3) F. Herman and S. Skillman, "Atomic Structure Calculations", Prentice-Hall, 1963.
- 4) K. H. Johnson, J. Chem. Phys., 45 (1966)3085. K. H. Johnson and F. C. Smith, Jr., Phys. Rev. Lett., 24 (1970)139.
- 5) H. Adachi, M. Tsukada and C. Satoko, J. Phys. Soc. Jpn., 45 (1978)875.
- 6) H. Adachi and S. Imoto, J. Phys. Soc. Jpn., 46 (1979)1194.
- 7) H. Adachi, S. Nasu and F. E. Fujita, Material Sci. Forum, 37 (1989)173.
- 8) H. Kimura, S. Imanaga, H. Hayafuji and H. Adachi, J. Phys. Soc. Jpn. 62 (1993)2663.
- 9) K. Fukushima and H. Adachi, Jpn. J. Appl. Phys., 28 (1989)1851.
- 10) H. Adachi and M. Takano, J. Solid State Chem., 93 (1991)556.
- 11) T. Ozeki et al., Analyt. Sci., 7 (1991)Suppl. 713.
- 12) 足立、中松、向山、X線分光の進歩、23 (1992)19.
- 13) 足立、田辺、表面、14 (1976)595. M. Tsukada et al., Progr. in Surface Sci., 14 (1983)113.
- 14) M. Morinaga et al., J. Phys. Soc. Jpn., 53 (1984)653. 森永ら、鉄と鋼, 71 (1985)1441.
- 15) 森永ら、日本金属学会会報、27 (1988)165. 森永ら、アルトピア、21 (1991)23. M. Morishita, M. Chikuda, Y. Ashida, M. Morinaga, N. Yukawa and H. Adachi, Mater. Trans. JIM, Vol. 32 (1991), 264. 森下、築田、芦田、森永、湯川、足立、日本金属学会会報、Vol. 54 (1990), 1369
- 16) A. Rosen and D. E. Ellis, J. Chem. Phys., 62 (1975)3039. H. Adachi, A. Rosen and D. E. Ellis, Molecular Sci., 33 (1977)199.
- 17) K. Siegbahn, C. Nordling, G. Johansson, J. Hedman, K. Hamrin, U. Gelius, T. Bergmark, L. O. Werme, R. Mann and Y. Baer, "ESCA Applied to Free Molecules", North-Holland Publishing Co., 1969.
- 18) H. Nakamatsu, T. Mukoyama, H. Adachi : Chem. Phys., 143, 221 (1990).
H. Nakamatsu, T. Mukoyama, H. Adachi : J. Chem. Phys., 95, 3167 (1991).
- 19) H. Adachi and K. Taniguchi, J. Phys. Soc. Jpn., 49 (1980)1944.

- 20) F. A. Gianturco, C. Guidotti, U. Lamanna : J. Chem. Phys., 57, 840 (1972).
- 21) T. M. Zimkina, A. S. Vinogradov : J. Phys. Paris Colloq., 32, C4-3 (1971).
- 22) I. Tanaka, J. Kawao and H. Adachi, Solid State Commun., 93(1995)533.
- 23) A. Rosen and D. E. Ellis.
- 24) H. Adachi, Technical. Rept. Osaka Univ. 27(1977)569.
- 25) B. I. Kim, H. Adachi and S. Imoto, Chem. Letters 1977(1977)109.
J. Onoe, K. Takeuchi, H. Nakamatsu, T. Mukouyama, R. Sekine and H. Adachi, J. Electr. Spectr. 60(1992)29. 尾上、中松、関根、向山、足立、武内、
レーザー科学研究 No.14(1992)134.
- 26) J. Onoe, K. Takeuchi, H. Nakamatsu, T. Mukouyama, R. Sekine, B. I. Kim and H. Adachi J. Chem. Phys. 99(1993)6810. J. Onoe, R. Sekine, K. Takeuchi, H. Nakamatsu, T. Mukouyama and H. Adachi, Chem. Phys. Letters. 217(1994)61.
- 27) J. Onoe, K. Takeuchi, H. Nakamatsu, T. Mukouyama, R. Sekine and H. Adachi, Chem. Phys. Letters, .196(1992)636.
- 28) 尾上、中松、関根、向山、足立、武内、レーザー科学研究No.15(1993)88.
- 29) T. Mukouyama, H. Nakamatsu and H. Adachi, J. Electr. Spectr. 63(1993)409.
- 30) 平田 勝 : 私信

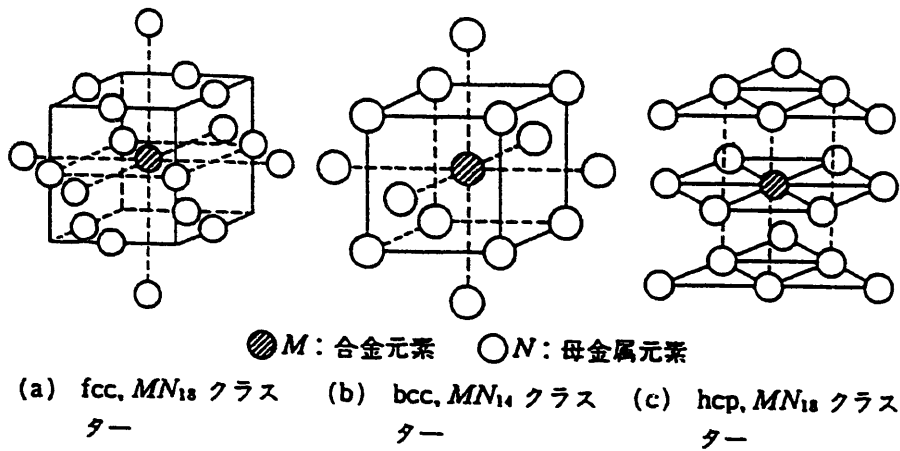
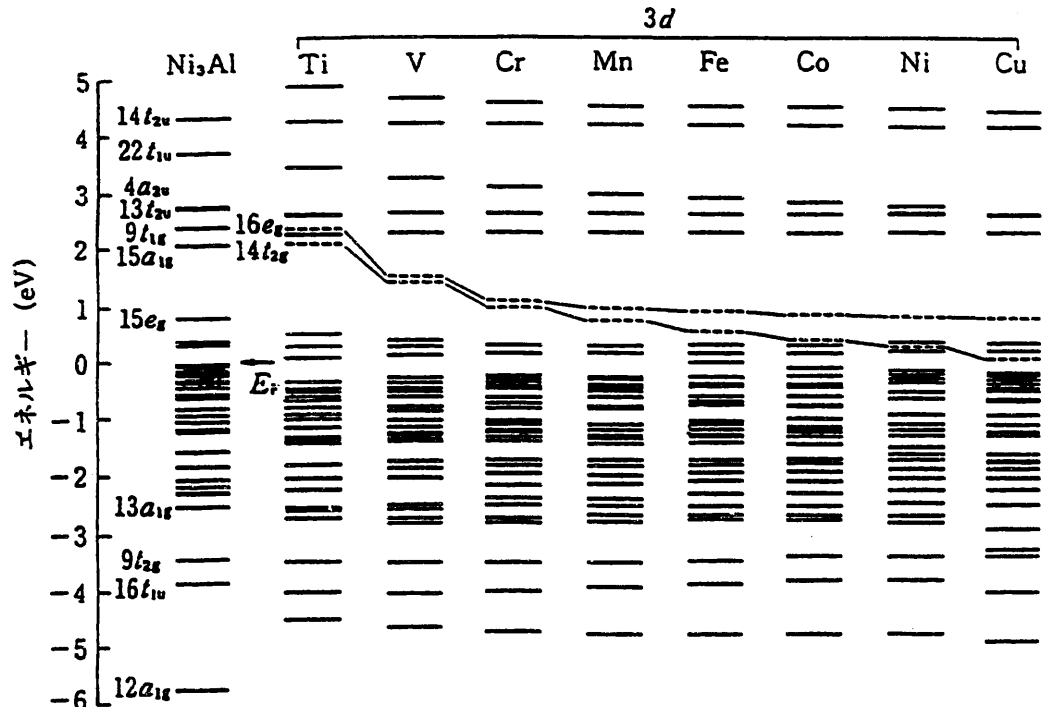
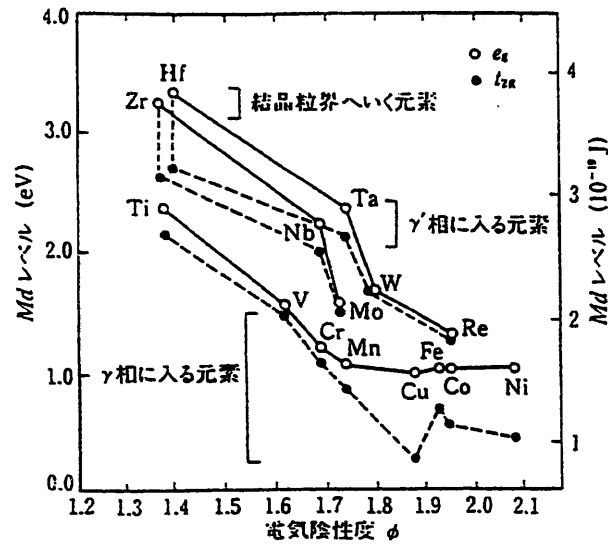


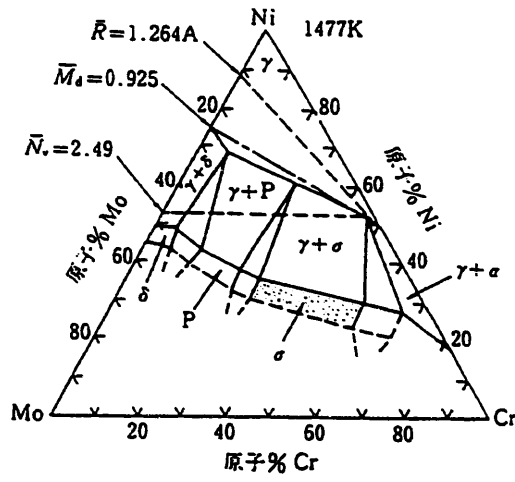
図1 クラスターモデル



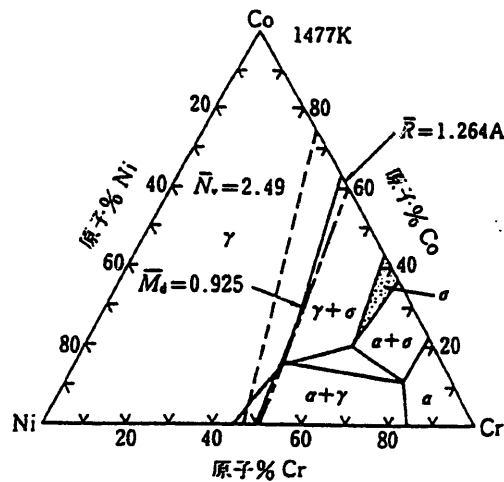
第2図 Ni_3Al 相のモデルクラスターの価電子レベル構造.



第3図 合金元素Mのdレベル・エネルギーと電気陰性度との関係。



(b) Ni-Cr-Mo



(a) Ni-Co-Cr

図4 三元系合金の等温状態図

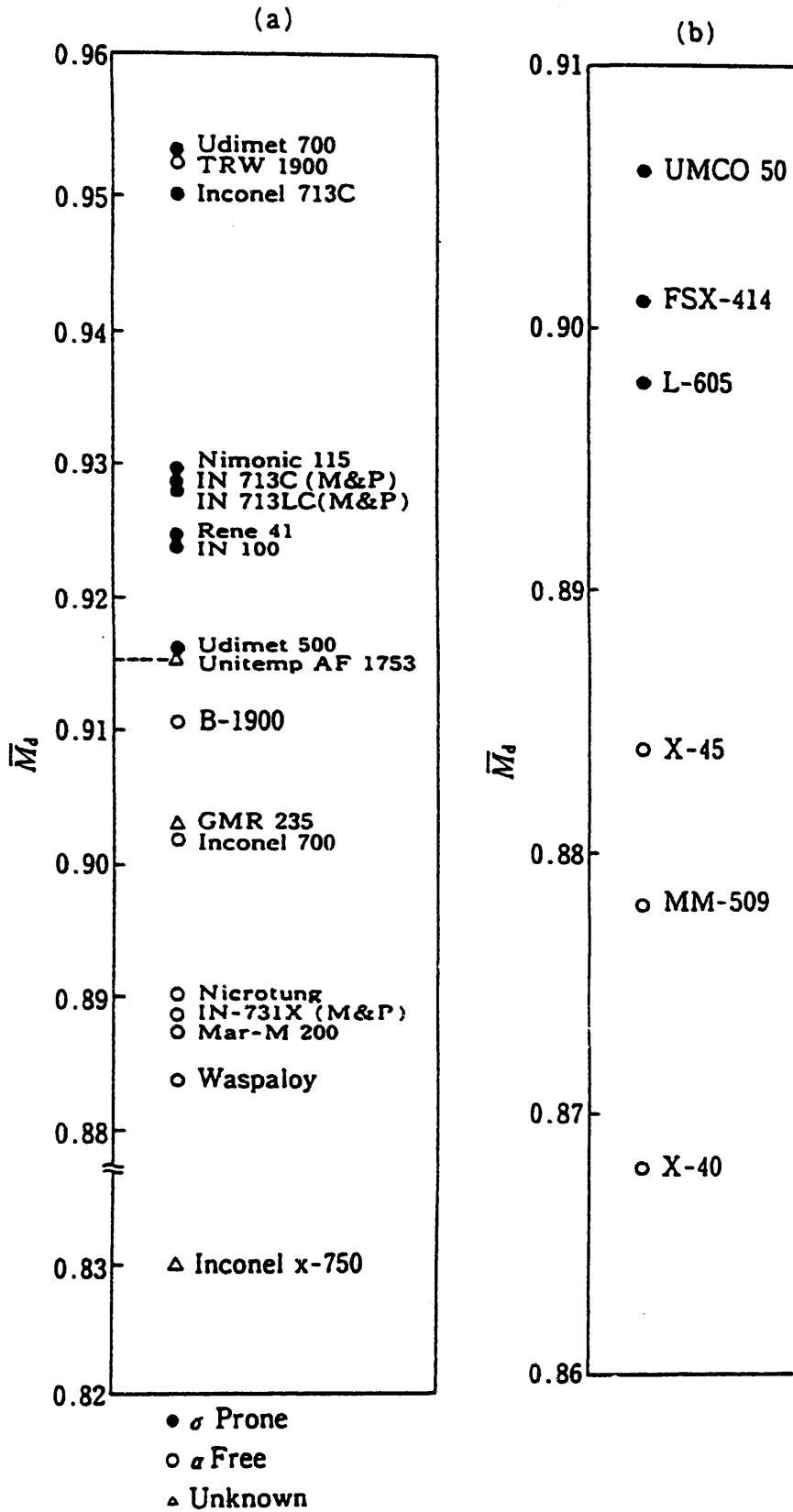


図5 実用合金の M_d 値のプロット

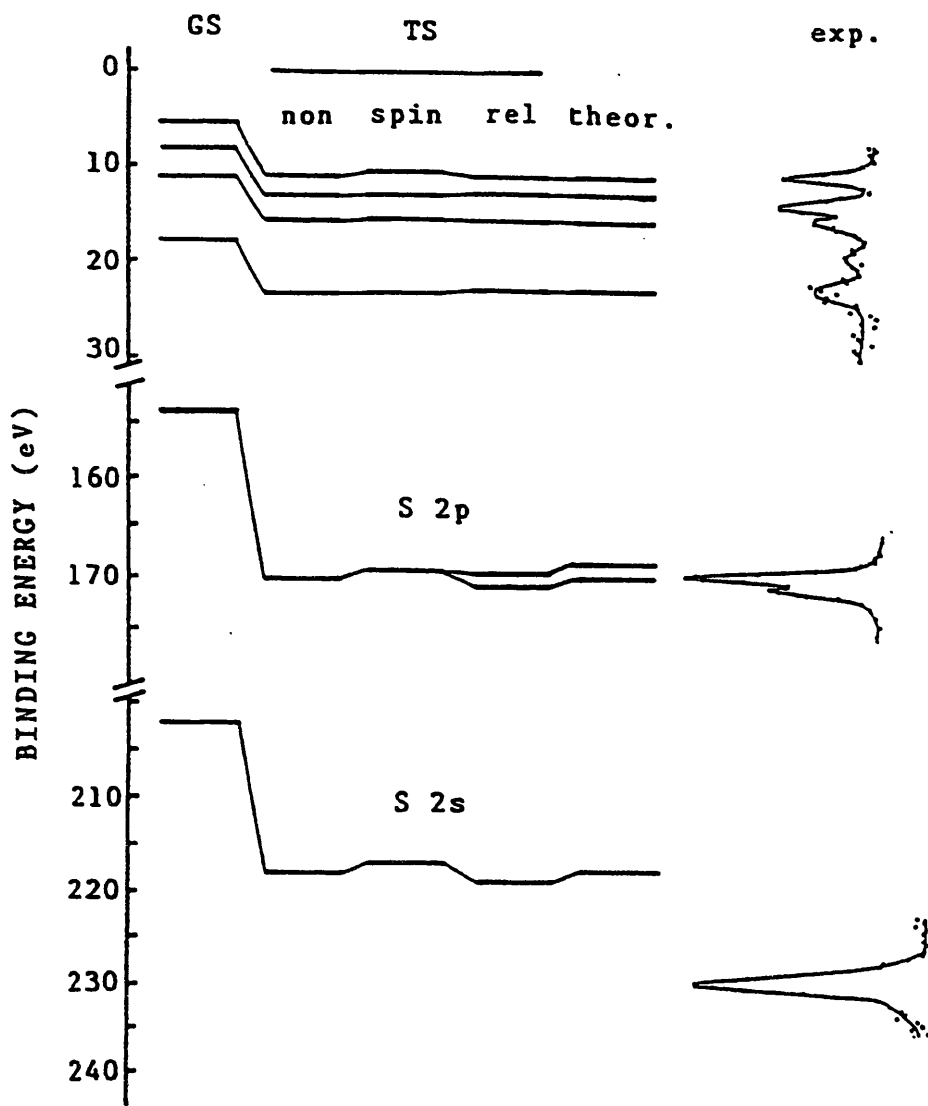


図6 H₂S分子の軌道エネルギーとイオン化エネルギー

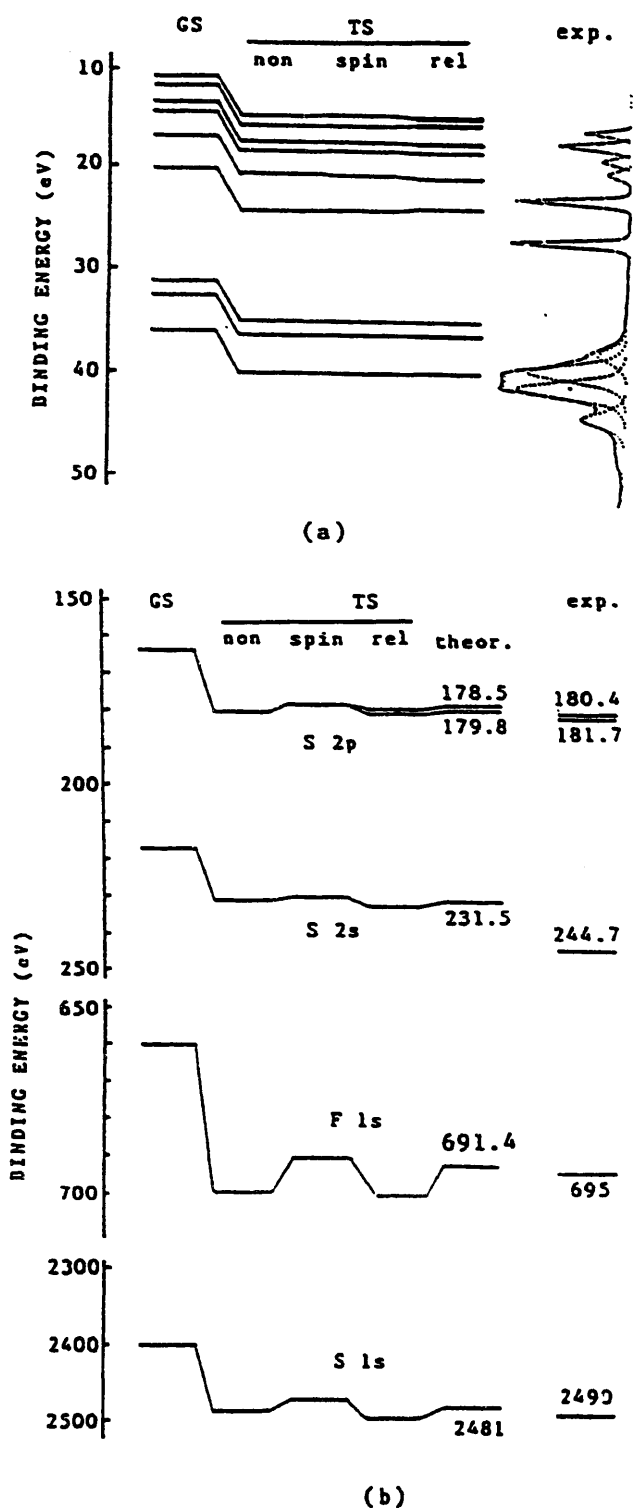


図7 SF₆分子の軌道エネルギーとイオン化エネルギー

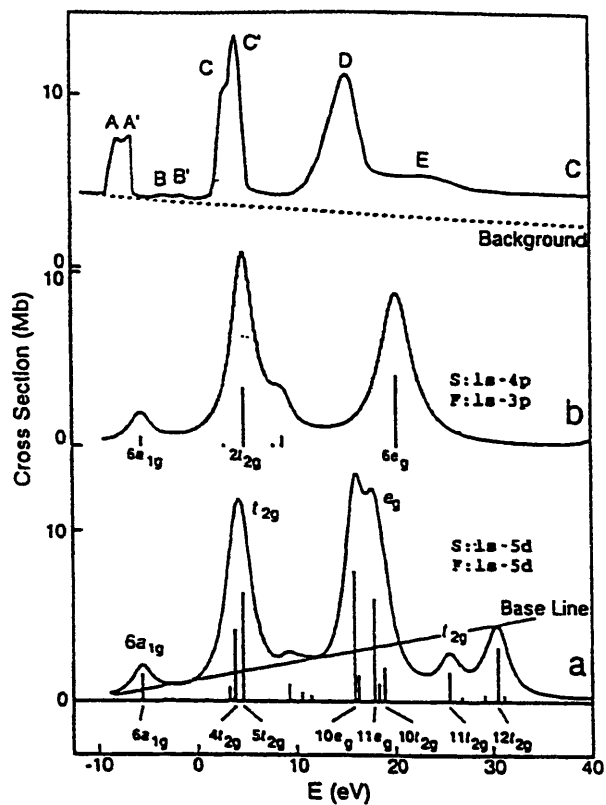


図8 SF₆分子のS-L2,3 XANESスペクトルと理論スペクトル

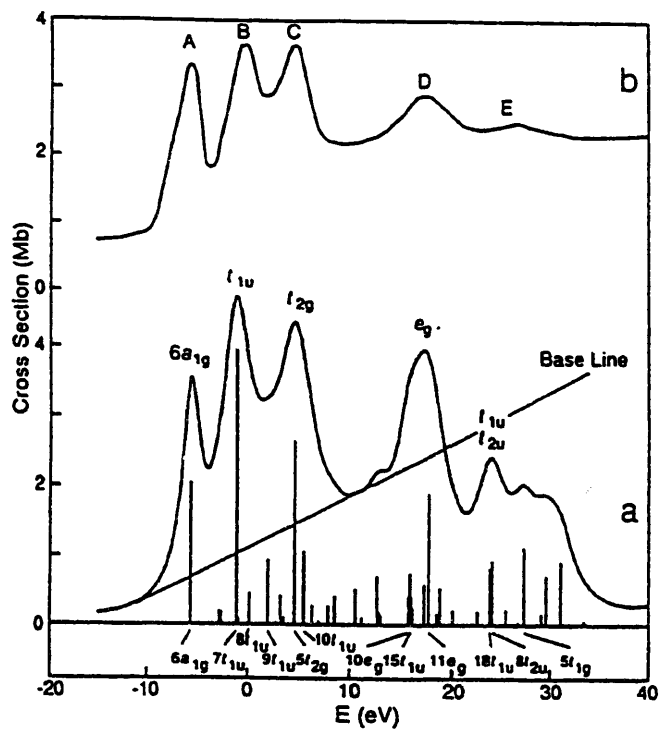


図9 SF₆分子のF-K XANESスペクトルと理論スペクトル

第1表 Ni 基合金のパラメータ
- Md と結合次数.

合金元素	Md (eV)	結合次数 B_0
Al	1.900	0.533
Si	1.900	0.589
Ti	2.271	1.098
V	1.543	1.141
Cr	1.142	1.278
Mn	0.957	1.001
Fe	0.858	0.857
Co	0.777	0.697
Ni	0.717	0.514
Cu	0.615	0.272
Zr	2.944	1.479
Nb	2.117	1.594
Mo	1.550	1.611
Hf	3.020	1.518
Ta	2.224	1.670
W	1.655	1.730

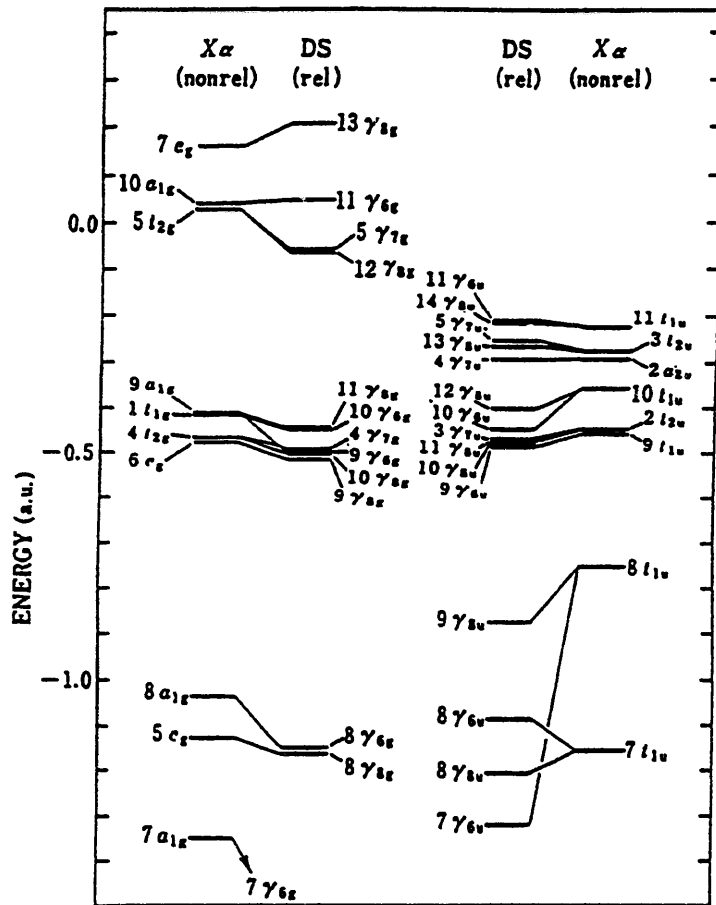


図10 UF₆ 分子の軌道準位。非相対論計算と相対論計算との比較

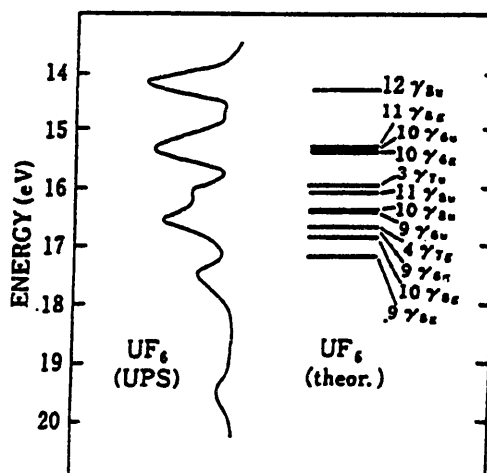


図11 UF₆ 分子のUPS スペクトルの計算と実験との比較

```

C*****
C          MAIN PROGRAM RSCAT
C  RELATIVISTIC DV X-ALPHA MOLECULAR ORBITAL CALCULATION
C*****
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  PARAMETER(NwC=#C )
  COMMON /IOCNTR/ IFL1,IFL2,IFL3,IFL4,IFL5,IFL6,IFL7,IFL8,ITSTR,
& INPUT,IOUT,IPUN,IEIG,ITP,IYL,ISAV,IEXPC,JPRT,JPUN
  DIMENSION XZX(NwC)
  OPEN(3,FILE='f03')
  OPEN(5,FILE='f05')
  OPEN(7,FILE='f07')
  OPEN(6,FILE='f06')
  OPEN(8,FILE='f08')
  OPEN(17,FILE='f17')
  OPEN(25,FILE='f25')
  OPEN(26,FILE='f26')
  OPEN(27,FILE='f27')
  OPEN(36,FILE='f36')
  OPEN(9,FILE='f09',FORM='UNFORMATTED')
  OPEN(15,FILE='/users/oda/tmp/f15',FORM='UNFORMATTED')
  OPEN(32,FILE='/users/oda/tmp/f32',FORM='UNFORMATTED')
  OPEN(39,FILE='f39',FORM='UNFORMATTED')
  WRITE (6,1)
  CALL FREAD (1,XZX)
  CALL DINTAL
  CALL ATCALC
  CALL CATOM
  CALL POPANL
  CALL SFSTOR (1)
  STOP
1 FORMAT(' BEGINING OF DV-DS ')
  END
C*****
C  SUBROUTINE DINTAL
C*****
  SUBROUTINE DINTAL
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  CHARACTER*4 NSCF,NSCC,KSCF,QMOL,QGRD,TITLE,ANAME,IGL
  CHARACTER*4 QNON
  PARAMETER(NwC=#C )
  COMMON /CHARCT/ NSCF,NSCC,KSCF,QMOL(10),QGRD,IGL,
& TITLE(4,#M),ANAME(10,#X)
  COMMON /IOCNTR/ IFL1,IFL2,IFL3,IFL4,IFL5,IFL6,IFL7,IFL8,ITSTR,
& INPUT,IOUT,IPUN,IEIG,ITP,IYL,ISAV,IEXPC,JPRT,JPUN
  COMMON /PRCORE/ XZX(NwC),XE(NwC,#X),ELC1(NwC,#X),
& JOUT(NwC,#X),NNLZ(NwC),LOCOR(NwC),INDX(NwC),NPOT(NwC)
  COMMON /CATCNT/ PHM,TOLE,DEL,TOL1,REMV1,REMV2,REMV3,

```

```

& LITERN, ICYCLE, IWRE, NDWAV, NDVR, NMAX, IPOP, JLV1, JLV2, JLV3,
& LSY1, LSY2, LSY3
COMMON /PROND/ ZN1(#X), DHD(#X), RS(#X), XALFA(#X),
& JCORE(#X), KMAX(#X), NIATOM(#X), NCO(#X), MSTAR(#X), KPLV(#X),
& INDEX(#X)
COMMON /PROCNT/ EXALF, XFAC, TL, RIDO, VIDO, TOLM, IDOA,
& KKK2, NCYCLE, NTABPT, NMAXK, NAT, NDAT, NCORE, NATOMS,
& NTYPES, NSYM, NAOS, NMOS, IIDO, LTIME, NNST, ITAPE,
& NTAPE, MAOS, MISOS, NSYMG, ITIME, ISYML(#M), JSYML(#M), NORB(#M)
COMMON /PROATM/ XVP(#HZ), YVP(#HZ), ZVP(#HZ), Z(#G), RO(#HZ),
& LMAXZ(#G), LMAXZS(#G), JMAXZ(#G), NEQP(#HZ), NEQ(#G)
COMMON /PRMESH/ RHS(#LZ, #X), RHO(#LZ, #X)
COMMON /PRAMO/ EIGNR(#EZZ), EIGNI(#EZZ), NPART(#EZZ),
& KAT(#AZ), MCOPT(#AZ), MVAL(#AZ), LVAL(#AZ), JVAL(#AZ),
& LOCA(#AZ), NBPT(#AZ)
COMMON /CJX/ XJX(NwC), XJ(NwC)
COMMON / / XN(NwC), XL(NwC), DXZ(NwC), XZ(NwC), XZ2(NwC), A(NwC), B(NwC)
DATA P4, ETL, QNON /0.0795774715D0, .5D-1, 'NONS' /
DATA AAZ /0.000001D01/
INPUT=5
READ(INPUT, 1) IOUT, IPUN, IEIG, ITP, IYL, ISAV, IEXPC, IFL8
CALL FILGEN
READ(INPUT, 1001) QMOL, RIDO, VIDO, IDOA
WRITE(IOUT, '(/10A4, '' RSCAT VER. 2.01'' /)') QMOL
IF(DABS(RIDO).LT.AAZ) RIDO=5.D0
IF(DABS(VIDO).LT.AAZ) VIDO=-1.D0
READ(INPUT, 2) KSCF, QGRD, NCYCLE, NTABPT, NMAXK, NNST, LTIME, NTAPE,
& ITAPE, JPRT, JPUN, TOLM
READ(INPUT, 1) NAT, NDAT, NCORE, NATOMS, NTYPES
READ(INPUT, 3) (NEQ(I), Z(I), I=1, NAT)
READ(INPUT, 4) TL, LSY1, JLV1, REMV1, LSY2, JLV2, REMV2, LSY3, JLV3, REMV3
IF(NTABPT.EQ.0) NTABPT=300
IF(DABS(TOLM).LT.AAZ) TOLM=ETL
IF(DABS(TL).LT.AAZ) QGRD=QNON
IF(LTIME.EQ.0) LTIME=600
READ(INPUT, 1) ITIME
IF(ITIME.EQ.10) RETURN
JSUM=0
DO 20 ND=1, NTYPES
NDDD=ND
CALL DINPT(N, J, ZN, LOCO, XALPH, RHS(1, NDDD), RHO(1, NDDD), XE(1, NDDD),
& H, NDDD, ANAME)
READ(INPUT, 5) (JOUT(I, ND), I=1, J)
IF(N.GT.NTABPT) GO TO 1000
DHD(ND)=H
RS(ND)=RHS(N, ND)
ZN1(ND)=ZN
KMAX(ND)=N

```



```

XALFA(ND)=XALPH
DO 10 K=1,NTABPT
RHO(K,ND)=RHO(K,ND)*P4/(RHS(K,ND)**2)
IF(K.LE.NTABPT) GO TO 10
RHO(K,ND)=0.0D0
10 CONTINUE
IF(ND.GT.NDAT) GO TO 20
JJ=0
DO 15 I=1,J
ELC1(J,ND)=XZ(J)
IF(JOUT(I,ND).EQ.1) GO TO 15
JJ=JJ+1
JSUM=JSUM+1
NX=XN(I)
LX=XL(I)
JX=XJ(I)*2.0
NNLZ(JSUM)=100*NX+10*LX+JX
LOCOR(JSUM)=LOC0
NPOT(JSUM)=1
XE(JJ,ND)=XE(I,ND)
XZX(JSUM)=XZ(I)
XJX(JSUM)=XJ(I)
15 CONTINUE
JCORE(ND)=JJ
NIATOM(ND)=0
20 CONTINUE
IF(JSUM.NE.NCORE) GO TO 2000
DO 30 IA=1,NAT
NQ=NEQ(IA)
IF(NQ.EQ.0) NQ=IA
ABC=ZN1(NQ)
ACB=Z(IA)
SSS=DABS(ABC-ACB)
IF(SSS.GT.AAZ) GO TO 3000
NIATOM(NQ)=NIATOM(NQ)+1
30 CONTINUE
CALL DIMCHK
WRITE(IOUT,5001)
5001 FORMAT(10X,' AT THE BEGINING OF CORES' )
CALL CORES(NCORE,NDAT,LOCOR,MSTAR,NC0,INDEX,INDX,JPRT,IOUT,NTYPES)
CALL SYMTRY
CALL PREPAR(NAOS,LVAL,MVAL,JVAL,JPRT,IOUT)
CALL PTGET
RETURN
1000 WRITE(IOUT,6)
STOP
2000 WRITE(IOUT,7)
STOP

```

```

3000 WRITE(10UT, 8) ABC, ACB
      STOP
      1 FORMAT(16I5)
      2 FORMAT(2A4, 2X, 9I5, D15.5)
      3 FORMAT(8(I5, F5.1))
      4 FORMAT(F10.5, 3(2I5, F10.5))
      5 FORMAT(80I1)
      6 FORMAT(5X, ' N TOO LARGE' )
      7 FORMAT(5X, ' ERROR IN NCORE' )
      8 FORMAT(5X, ' Z(I) ERROR', 2F10.5)
1001 FORMAT(10A4, 2F10.5, I5)
      END

```

```

C*****
C SUBROUTINE DINPT
C*****

```

```

SUBROUTINE DINPT(N, J, ZN, LOCO, XALPH, RAD, RH, XE, H, NE, ANAME)
  IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
  CHARACTER*4 ANAME
  PARAMETER(NwC=#C )
  COMMON /IOCNT/ IFL1, IFL2, IFL3, IFL4, IFL5, IFL6, IFL7, IFL8, ITSTR,
& INPUT, IOUT, IPUN, IEIG, ITP, IYL, ISAV, IEXPC, JPRT, JPUN
  COMMON / / XN(NwC), XL(NwC), DXZ(NwC), XZ(NwC), XZ2(NwC), A(NwC), B(NwC)
  COMMON /CJX/ XJX(NwC), XJ(NwC)
  COMMON /NATC/ IATC(#X), IATD
  DIMENSION RAD(*), RH(*), XE(*), ANAME(10, #X)
  DATA AAZ, ABZ, ACZ, AFZ, AHZ, AJZ, ATZ /
& .0D0, .6D2, .32D2, .1D-6, .1D1, .8D1, .2D1/
  DATA AUZ /.60D2/
  READ(INPUT, 11) (ANAME(I, NE), I=1, 10)
  READ(INPUT, 12) LOCO, N, J
  READ(INPUT, 13) ZN, XALPH, RN, H, XION, XION2
  IF(LOCO.EQ.0) GO TO 1000
  IF(DABS(XALPH).LT.AFZ) XALPH=AHZ
  IF(DABS(RN).LT.AFZ) RN=ABZ
  IF(DABS(H).LT.AFZ) H=ACZ
  IF(N.EQ.0) N=300
  H=AHZ/H
  IF(J.EQ.0) GO TO 8
  SUM=AAZ
  SUM2=AAZ
  IDD=0
  DO 7 I=1, J
  READ(INPUT, 14) XN(I), XL(I), XJ(I), XE(I), XZ(I), XZ2(I)
  IF(I.EQ.1.AND.DABS(XZ2(1)).LT.AFZ) IDD=1
  IF(IDD.EQ.1) XZ2(I)=XZ(I)
  SUM=SUM+XZ(I)
  SUM2=SUM2+XZ2(I)
  UUU=XN(I)-XL(I)-AHZ

```

```

    IF(-UUU.GT.AFZ) GO TO 1000
    DXZ(1)=XZ2(1)-XZ(1)
7  CONTINUE
8  CONTINUE
    READ(IFL3,20) (RH(1), I=1, 5)
    IATC(LOCO)=0
    IF(DABS(RH(1)).LT.AFZ) IATC(LOCO)=1
    IF(DABS(RH(1)).LT.AFZ) GO TO 450
    READ(IFL3,20) (RH(1), I=6, N)
450 D=DEXP(H)
    R=RN/D**N
    DO 222 K=1, N
    R=R*D
    RAD(K)=R
    IF(DABS(RH(1)).LT.AFZ) RH(K)=AAZ
222 CONTINUE
    IF(DABS(RH(1)).LT.AFZ) GO TO 510
    DO 500 I=1, J
    IF(DABS(DXZ(1)).GT.AFZ) GO TO 460
500 CONTINUE
    GO TO 480
510 DO 600 I=1, J
600 DXZ(1)=XZ(1)
460 DO 610 K=1, J
610 A(K)=AAZ
    NJM=0
    DO 630 K=1, J
    B(K)=DSQRT(-AJZ*XE(K))
    NJM=ATZ*(XN(K)-XL(K))+AFZ
    DFAC=AHZ
    DO 620 NK=1, NJM
    FNK=NK
620 DFAC=DFAC*FNK
    A(K)=B(K)**(NJM+1)/DFAC
630 CONTINUE
    DO 670 I=1, N
    RV=RAD(I)
    SUM=AAZ
    DO 660 K=1, J
    VAL=RV*B(K)
    IF(AUZ-VAL.LT.AFZ) GO TO 660
    NJM=ATZ*(XN(K)-XL(K))+AFZ
    SUM=SUM+DXZ(K)*A(K)*DEXP(-VAL)*RV**NJM
660 CONTINUE
    RH(1)=RH(1)+SUM
670 CONTINUE
480 CONTINUE
    RETURN

```

```

11 FORMAT(10A4)
12 FORMAT(16I5)
13 FORMAT(8F10.5)
14 FORMAT(3F5.1,F12.6,3F12.5)
20 FORMAT(5D14.7)
1000 WRITE(IOUT,25)
25 FORMAT(1X,'INPUT DATA ERROR')
STOP
END

```

C*****

C SUBROUTINE DIMCHK

C*****

```

SUBROUTINE DIMCHK
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
CHARACTER*4 NSCF, NSCC, KSCF, QMOL, QGRD, TITLE, ANAME, IGL
CHARACTER*6 BNAME, CNAME
PARAMETER(NwC=#C)
COMMON /CHARCT/ NSCF, NSCC, KSCF, QMOL(10), QGRD, IGL,
& TITLE(4, #M), ANAME(10, #X)
COMMON /IOCNT/ IFL1, IFL2, IFL3, IFL4, IFL5, IFL6, IFL7, IFL8, ITSTR,
& INPUT, IOUT, IPUN, IEIG, ITP, IYL, ISAV, IEXPC, JPRT, JPUN
COMMON /PROCNT/ EXALF, XFAC, TL, RIDO, VIDO, TOLM, IDOA,
& KKK2, NCYCLE, NTABPT, NMAXK, NAT, NDAT, NCORE, NATOMS,
& NTYPES, NSYM, NAOS, NMOS, IIDO, LTIME, NNST, ITAPE,
& NTAPE, MAOS, MISOS, NSYMG, ITIME, ISYML(#M), JSYML(#M), NORB(#M)
COMMON /PRCORE/ XZX(NwC), XE(NwC, #X), ELC1(NwC, #X),
& JOUT(NwC, #X), NNLZ(NwC), LOCOR(NwC), INDX(NwC), NPOT(NwC)
COMMON /PROATM/ XVP(#HZ), YVP(#HZ), ZVP(#HZ), Z(#G), RO(#HZ),
& LMAXZ(#G), LMAXZS(#G), JMAXZ(#G), NEQP(#HZ), NEQ(#G)
COMMON /PRMESH/ RHS(#LZ, #X), RHO(#LZ, #X)
COMMON /PROND/ ZN1(#X), DHD(#X), RS(#X), XALFA(#X),
& JCORE(#X), KMAX(#X), NIATOM(#X), NCO(#X), MSTAR(#X), KPLV(#X),
& INDEX(#X)
DIMENSION BNAME(4), CNAME(4)
DATA BNAME/' SSOGT', ' FOCKM', ' EMERGE', ' OCCUP' /
DATA CNAME/' SSOGT', ' SSOGT', ' FOCKM', ' EMERGE' /
DATA MAXNAT, MAXNDT, MAXCOR, MAXNAS, MAXNTS, MAXNMS/
& #G, #X, NwC, #HZ, #X, #JZZ /
DATA MAXNPT, MAXCLE /
& #LZ, #K /
WRITE(IOUT,1001) QMOL(1)
WRITE(IOUT,1) KSCF, QGRD, IPUN, IEIG, ITP, IYL, ISAV, IEXPC
WRITE(IOUT,2) JPRT, ITIME, LTIME, NTAPE, ITAPE, JPUN
WRITE(IOUT,3) NTABPT, NMAXK, NCYCLE
IF(NTABPT.GT.MAXNPT) GO TO 2000
WRITE(IOUT,4) NAT, NDAT, NATOMS, NTYPES, NCORE
IF(NAT.GT.MAXNAT) GO TO 1000
IF(NATOMS.GT.MAXNTS) GO TO 1000

```

```

IF(NDAT.GT.MAXNDT) GO TO 1000
IF(NTYPES.GT.MAXNTS) GO TO 1000
IF(NCORE.GT.MAXCOR) GO TO 1000
WRITE(IOUT,5) (NIATOM(I), ANAME(1, I), I=1, NDAT)
WRITE(IOUT,6) (J, NEQ(J), J=1, NAT)
WRITE(IOUT,1002)
DO 17 ND=1, NDAT
WRITE(IOUT,7) (ANAME(I, ND), I=1, 10)
WRITE(IOUT,8) ND, KMAX(ND), JCORE(ND)
WRITE(IOUT,9) ZN1(ND), XALFA(ND), DHD(ND)
IF(JPRT.LT.1) GO TO 17
KK=KMAX(ND)
WRITE(IOUT,10) (RHS(K, ND), RHO(K, ND), K=1, KK, JPRT)
17 CONTINUE
NADD=NDAT+1
IF(NADD.GT.NTYPES) GO TO 20
WRITE(IOUT,11)
DO 18 ND=NADD, NTYPES
WRITE(IOUT,7) (ANAME(I, ND), I=1, 10)
WRITE(IOUT,8) ND, KMAX(ND)
WRITE(IOUT,9) ZN1(ND), XALFA(ND), DHD(ND)
IF(JPRT.LT.2) GO TO 18
KK=KMAX(ND)
WRITE(IOUT,10) (RHS(K, ND), RHO(K, ND), K=1, KK, JPRT)
18 CONTINUE
20 CONTINUE
WRITE(IOUT,12)
DO 30 I=1, NCORE
WRITE(IOUT,13) I, LOCOR(I), NNLZ(I), XZX(I)
30 CONTINUE
WRITE(IOUT,14)
IF(ITIME.GT.0) WRITE(IOUT,1003) ITIME, BNAME(ITIME), CNAME(ITIME)
IF(ITAPE.GE.1) WRITE(IOUT,1004) ITAPE
IF(ITAPE.GE.2) WRITE(IOUT,1005)
DO 35 I=1, MAXNAS
35 NEQP(I)=0
IF(NAT.GE.MAXNAT) RETURN
NAT1=NAT+1
DO 40 I=NAT1, MAXNAT
40 NEQ(I)=0
RETURN
1000 WRITE(IOUT,15)
STOP
2000 WRITE(IOUT,16)
STOP
1001 FORMAT(1H1,5X,'***** H-F-S MOLECULAR CALCULATION FOR ', A4,
& ' MOLECULE *****' )
1 FORMAT(10X,A4,' OF ',A4, ' STATE'/10X,' FOLLOWING I/O',

```

```

& ' FILES ARE USED, IPUN, IEIG, ITP, IYL, ISAV, IEXPC = '/20X, 615)
2 FORMAT( 10X, ' I/O CONTROL PARAMETER JPRT, ITIME, LTIME, NTAPE, ITAPE,
& JPUN = '/ 10X, 615)
3 FORMAT( 10X, ' NO. OF MESH POINTS =', 15, 5X, ' NO. OF D-V SAMPLING PO
& INTS =', 15, 5X, ' NCYCLE =', 13)
4 FORMAT( 10X, ' MOLECULE CONTAINS ', 13, ' ATOMS CONSIST OF ', 13,
& ' DIFFERENT ATOMS' /10X, ' CLUSTER CONSIST OF ', 13, ' AND ', 13,
& ' DIFFERENT ATOMS' /10X, ' NO OF CORE USED IS', 15)
5 FORMAT( 4(10X, 15, ' ATOMS OF ', A4))
6 FORMAT( 3(10X, 15, ' TH ATOM ND =', 13))
7 FORMAT( 10X, 10A4)
8 FORMAT(/10X, 215, ' MESH POINTS, ', 15, ' CORES USED')
9 FORMAT(/10X, ' ATOM NO. =', F5.1, ' XALPHA =', F10.5, ' MESH INCREMENT
& IN LOG SCALE =', F10.5)
10 FORMAT(/10X, ' R(1) AND RHO(1)' / (10D13.6))
11 FORMAT( 10X, ' FOLLOWING ATOMS ADDED FOR POTENTIAL' )
12 FORMAT( 10X, ' FOLLOWING CORES USED' /)
13 FORMAT(10X, 15, ' LOCOR =', 13, '>NNLZ =', 15,
& ' NO. OF ELECTRONS =', F10.5)
14 FORMAT( 10X, ' ABOVE DATA USED FOR STARTING POINT AND DIMENSIONS
& CHECKED *****' )
15 FORMAT(' DIMENSION OVER IN NA, NDAT, NATOMS, NTYPES, NCORES' )
16 FORMAT(' DIMENSION OVER IN NTABPT, NMAX, NCYCLE' )
1002 FORMAT( 10X, ' FOLLOWING ATOMS USED FORM. O. CALCULATION' )
1003 FORMAT( ' *** ITME =', 13, ' THE LAST JOB STOPED IN',
& A4, ' THIS JOB WILL START FROM ', A4)
1004 FORMAT( ' *** ITAPE =', 13, ' INPUT DATA FOR NEXT JOB WILL BE',
& ' WRITTEN TO FILE IPUN' )
1005 FORMAT(' *** DATA NEEDED IN ITERATION WILL BE WRITTEN TO FILE IPUN
& ')
END

```

C*****

C SUBROUTINE CORES

C*****

```

SUBROUTINE CORES(NCORE, NDAT, LOCOR, MSTAR, NCO, INDEX, INDX, JPRT, IOUT,
& NTYPES)

```

```

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

```

```

DIMENSION LOCOR(*), MSTAR(*), NCO(*), INDEX(*), INDX(*)

```

```

LOLAST = -1

```

```

IDX = 0

```

```

DO 50 M=1, NCORE

```

```

LO = LOCOR(M)

```

```

IF( LO.NE.LOLAST ) GO TO 7

```

```

GO TO 30

```

```

7 LOLAST = LO

```

```

MSTAR(LO) = M

```

```

IDX = IDX + 1

```

```

IF( IDX.GT.NTYPES) GO TO 4003

```

```

INDEX(LO) = IDX
NCO(IDX) = 0
30 CONTINUE
NCO(IDX) = NCO(IDX) + 1
INDX(M)=IDX
50 CONTINUE
IF(JPRT.LT.1) RETURN
WRITE(IOUT,5005) (LO,MSTAR(LO),LO=1,NDAT)
WRITE(IOUT,5006) (LO,INDEX(LO),LO=1,NDAT)
WRITE(IOUT,5008) IDX, (NCO(I), I=1, IDX)
WRITE(IOUT,5009) (M, INDX(M), M=1, NCORE)
RETURN
4003 WRITE(IOUT,5003)
STOP
5003 FORMAT(' IDX. GT. NTYPES' )
5005 FORMAT(/10X, 'MSTAT(LO) ',5(13,' '),13,4X)
5006 FORMAT(/10X, 'INDEX(LO) ',5(13,' '),13,4X)
5008 FORMAT(/10X, 'IDX =',13,5X, ' NCO(I) =',5I5)
5009 FORMAT(/10X, ' INDX(M) ',5(13,' '),13,5X)
END

```

C*****

C SUBROUTINE SYMTRY

C*****

```

SUBROUTINE SYMTRY
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
CHARACTER*4 NSCF, NSCC, KSCF, QMOL, QGRD, TITLE, ANAME, IGL
PARAMETER(NwC=#C )
COMMON /CHARCT/ NSCF, NSCC, KSCF, QMOL(10), QGRD, IGL,
& TITLE(4, #M), ANAME(10, #X)
COMMON /IOCNTR/ IFL1, IFL2, IFL3, IFL4, IFL5, IFL6, IFL7, IFL8, ITSTR,
& INPUT, IOUT, IPUN, IEIG, ITP, IYL, ISAV, IEXPC, JPRT, JPUN
COMMON /PROCNT/ EXALF, XFAC, TL, RIDO, VIDO, TOLM, IDOA,
& KKK2, NCYCLE, NTABPT, NMAXK, NAT, NDAT, NCORE, NATOMS,
& NTYPES, NSYM, NAOS, NMOS, IIDO, LTIME, NNST, ITAPE,
& NTAPE, MAOS, MISOS, NSYMG, ITIME, ISYML(#M), JSYML(#M), NORB(#M)
COMMON /PCORE/ XZX(NwC), XE(NwC, #X), ELC1(NwC, #X),
& JOUT(NwC, #X), NNLZ(NwC), LOGOR(NwC), INDX(NwC), NPOT(NwC)
COMMON /PRAMO/ EIGNR(#EZZ), EIGNI(#EZZ), NPART(#EZZ),
& KAT(#AZ), MCOPT(#AZ), MVAL(#AZ), LVAL(#AZ), JVAL(#AZ),
& LOCA(#AZ), NBPT(#AZ)
COMMON /MATOUT/ MVAL1(#AZ), ICHI(#AZ), KIDO(#AZ), ICHIS(20),
& ICHIT(20), NCHI(#AZ), MCOR(#AZ)
COMMON /PROATM/ XVP(#HZ), YVP(#HZ), ZVP(#HZ), Z(#G), RO(#HZ),
& LMAXZ(#G), LMAXZS(#G), JMAXZ(#G), NEQP(#HZ), NEQ(#G)
COMMON /PROND/ ZN1(#X), DHD(#X), RS(#X), XALFA(#X),
& JCORE(#X), KMAX(#X), NIATOM(#X), NCO(#X), MSTAR(#X), KPLV(#X),
& INDEX(#X)
COMMON / / CNR(#IZ), CNI(#IZ), MN(#IZ), NATOM(#IZ), IATOM(#IZ),

```

```

& ICNR(#IZ), ICNI(#IZ)
DATA MAXNMS, MAXIII, MAXMM, MAXISO, MAXSIZ, MAXKSZ, MAXNAO /
& #IZ, #AZ, #EZZ, #IZ, #DZZ, #BZZ, #AZ /
C      70, 500, 3000, 70, 4900, 2500, 500 /
WRITE(IOUT,7000)
7000 FORMAT(' AT THE BEGINING OF SYMTRY')
READ(INPUT,1000) NSYM, NSYMG, ISET
WRITE(IOUT,2000) NSYM
IF(NSYM.GT.20) GO TO 4006
READ(INPUT,1005) (ISYML(I), I=1, NSYM)
READ(INPUT,1005) (JSYML(I), I=1, NSYM)
1005 FORMAT(10I5)
WRITE(IOUT,2010) (I, ISYML(I), I, JSYML(I), I=1, NSYM)
2010 FORMAT( (' ISYML (' , I3, ' ) =', I4, 5X, ' JSYML (' , I3, ' ) =', I4))
JSYML(NSYM+1)=0
ISYML(NSYM+1)=0
DO 20 I=1, NAT
LMAXZS(I)=0
JMAXZ(I)=0
20 LMAXZ(I) = 0
NAOS = 0
MM = 0
III=1
KSIM=0
KSIZ=0
IF(ISET.EQ.0) GO TO 22
READ(INPUT,1002) NATT
READ(INPUT,1006) (IATOM(I), I=1, NATT)
1006 FORMAT(16I5)
22 CONTINUE
MISOS=0
DO 500 ISYM=1, NSYM
READ(IFL2, 1001) NDIM, (TITLE(I, ISYM), I=1, 4)
WRITE(IOUT,2001) NDIM, (TITLE(I, ISYM), I=1, 4)
ISO = 0
IBS = 0
MMS = MM + 1
IF(ISYML(ISYM).LE.0) MMS=MM
DO 300 N=1, NDIM
LNZ=0
READ(IFL2, 1002) LN, JN, NMS
IF(NMS.GT.MAXNMS) GO TO 4000
IF(NSYMG.EQ.0) READ(IFL2, 1003) (MN(I), NATOM(I), CNR(I), CNI(I),
& I=1, NMS)
IF(NSYMG.GT.0) READ(IFL2, 1004) (MN(I), NATOM(I), CNR(I), CNI(I),
& I=1, NMS)
IF(NSYMG.GE.0) GO TO 120
READ(IFL2, 1007) (MN(I), NATOM(I), ICNR(I), ICNI(I), I=1, NMS)

```



```

DO 110 I=1,NMS
DNR=ICNR(I)
DNI=ICNI(I)
SGNR=1.0
SGNI=1.0
IF(DNR.LT.0.0) SGNR=-1.0
IF(DNI.LT.0.0) SGNI=-1.0
CNR(I)=SGNR*DSQRT(SGNR*DNR)
CNI(I)=SGNI*DSQRT(SGNI*DNI)
110 CONTINUE
120 CONTINUE
1004 FORMAT(4(2I5,2D15.8))
IF(ISYML(ISYM).LE.0) GO TO 300
IF(ISET.EQ.0) GO TO 25
DO 23 I=1,NMS
NA=NATOM(I)
IF(NATOM(I).LE.0) GO TO 4010
IF(NATOM(I).GT.NAT) GO TO 4010
NATOM(I)=IATOM(NA)
23 CONTINUE
25 CONTINUE
NA = NATOM(1)
NQ = NEQ(NA)
IF(NQ.EQ.0) NQ=NA
IF(NQ.GT. NDAT) GO TO 300
IDX = INDEX(NQ)
MSTART = MSTAR(NQ)
MSTOP = MSTART + NCO(IDX) - 1
DO 90 M=MSTART,MSTOP
NN =>NNLZ(M)/100
LAM =>NNLZ(M)/10 - 10*NN
JAM=>NNLZ(M)-100*NN-10*LAM
IF( LAM. NE. LN. OR. JAM. NE. JN. OR. LOCOR(M). NE. NQ) GO TO 90
IF(III.GT.MAXIII) GO TO 4007
JNBAS=0
LNZ=LNZ+1
ISO = ISO + 1
MVAL1(III)=MN(NMS)
ICHI(III)=NATOM(1)
NCHI(III)=LOCOR(M)
KIDO(III)=>NNLZ(M)
MCOR(III)=M
III=III+1
IF(ISO.GT.MAXISO) GO TO 4004
DO 85 I=1,NMS
MM = MM + 1
JNBAS=JNBAS+1
IF(MM.GT.MAXMM) GO TO 4003

```

```

    IBS = IBS + 1
    EIGNR(MM)=CNR(1)
    EIGNI(MM)=CNI(1)
    IF( NAOS.EQ.0 ) GO TO 71
    DO 70 IA=1,NAOS
    IF( MCOPT(IA).NE.M.OR.MVAL(IA).NE.MN(1).OR.
&LOCA(IA).NE.NATOM(1) ) GO TO 70
    NPART(MM) = IA
    GO TO 85
70 CONTINUE
71 NAOS = NAOS + 1
    IF(NAOS.GT.MAXNAO) GO TO 4001
    MCOPT(NAOS) = M
    NA=NATOM(1)
    MVAL(NAOS) = MN(1)
    LVAL(NAOS) = LN
    JVAL(NAOS)=JN
    NPART(MM) = NAOS
    LOCA (NAOS)=NA
    NBPT(NAOS)=INDX(M)
85 CONTINUE
    KAT(111-1)=JNBAS
90 CONTINUE
    IF(LNZ.EQ.0) GO TO 300
    IF(1TIME.GT.0) GO TO 105
    IF(JPRT.GE.-2) WRITE(1OUT,2002) LN,JN,NMS,LNZ
    IF(JPRT.GE.-1) WRITE(1OUT,2003) (MN(1),NATOM(1),CNR(1),CNI(1),
& I=1,NMS)
105 CONTINUE
    DO 130 I=1,NMS
    NA=NATOM(1)
    LS=LN+1
    IF(2*LN.GE.JN) LS=LN-1
    IF(LS.GT.LMAXZS(NA)) LMAXZS(NA)=LS
    IF(JN.GT.JMAXZ(NA)) JMAXZ(NA)=JN
    IF(LN.GT.LMAXZ(NA)) LMAXZ(NA)=LN
130 CONTINUE
300 CONTINUE
    IF(ISYML(ISYM).LE.0) GO TO 500
    KSIM=KSIM+1
    IF(ISO.GT.MISOS) MISOS=ISO
    NORB(KSIM)=ISO
    NSIZ=ISO*ISO
    IF(NSIZ.GT.MAXSIZ) GO TO 4009
    IF(JSYML(ISYM).EQ.0) GO TO 101
    KSIZ=KSIZ+ISO*(ISO+1)/2
101 CONTINUE
    WRITE(1OUT,2004) (TITLE(I,ISYM),I=1,4),ISO,IBS,MM

```

```

      IF(JPRT.LT.0) GO TO 496
      IF(ETIME.GT.0) GO TO 496
      NC = 0
      DO 495 K=MMS,MM
      IP = NPART(K)
      NC = NC + 1
      MC = MCOPT(IP)
      WRITE(IOUT,2005) NC, IP, MCOPT(IP), NNLZ(MC), LOCA(IP), MVAL(IP),
&
&          EIGNR(K), EIGNI(K)
495 CONTINUE
496 DO 77 I=1,4
  77 TITLE(I,KSIM)=TITLE(I,ISYM)
     ISYML(KSIM)=ISYML(ISYM)
     JSYML(KSIM)=JSYML(ISYM)
500 CONTINUE
     NMOS=III-1
     NSYM=KSIM
     WRITE(IOUT,2009) NSYM
2009 FORMAT( /' NO. OF SYMMETRY BLOCKS USED =' ,15)
     IF(KSIZ.GT.MAXKSZ) GO TO 4008
     WRITE(IOUT,2006) NAOS
     IF(JPRT.LT.0) GO TO 511
     IF(ETIME.GT.0) GO TO 512
     DO 510 I=1,NAOS
     MC = MCOPT(I)
     WRITE(IOUT,2007) I, MC, NNLZ(MC), LOCA(I), LVAL(I), MVAL(I), JVAL(I),
&NBPT(I)
510 CONTINUE
511 IF(JPRT.GE.-2) WRITE(IOUT,2008) (I, LMAXZ(I), LMAXZS(I), JMAXZ(I),
& I=1, NAT)
512 CONTINUE
     KKK2=KSIZ
     MAOS=MM
     WRITE(IOUT,7001)
7001 FORMAT(' AT THE END OF SYMTRY')
     RETURN
1000 FORMAT(3I5)
1001 FORMAT(15,4A4)
1002 FORMAT(3I5)
1003 FORMAT(2I5,2D20.10)
1007 FORMAT(8(2I2,2I3))
2000 FORMAT(' NO. OF SYMMETRY BLOCKS =' ,15)
2001 FORMAT( /' NDIM =' ,15, ' ',4A4)
2002 FORMAT( /' L,2J=' ,2I4, ' AND THE NO. OF TERMS =' ,15,
&' NO. OF THIS SYM ORB USED IN THIS TIME =' ,13)
2003 FORMAT(' M =' ,14, ' ATOM NO. =' ,14, ' COEF(R,1). =' ,2D20.10)
2004 FORMAT( /' ',4A4/' NO. OF SYMMETRY ORBITALS =' ,15, ' NO. OF ATOMI
&C ORBITALS =' ,15, ' AND MM =' ,15)

```

```

2005 FORMAT(' ',14,'.',',', IP =',15,' MCOP =',15,'>NNLZ =',15,
&' LOCA =',15,' MVAL =',14,' EIGN =',2D14.7)
2006 FORMAT('1THE NUMBER OF ATOMIC ORBITALS =',15 )
2007 FORMAT(' ',14,'. MCOPT =',14,'>NNLZ =',14,' LOCA =',14,
&' L,J,M =',314,' NB POINTER =',15)
2008 FORMAT( /(' MAXIMUM VALUE OF L,LS,J ON SITE NO.',14,' WAS =',314))
4000 WRITE(IOUT,5000) NMS
5000 FORMAT( ' NMS =',15,' TOO LARGE')
STOP
4001 WRITE(IOUT,5001) NAOS
5001 FORMAT( ' NAOS =',15,' TOO LARGE')
STOP
4003 WRITE(IOUT,5003) MM
5003 FORMAT( ' MM =',15,' TOO LARGE')
STOP
4004 WRITE(IOUT,5004) ISO
5004 FORMAT( ' ISO =',15,' TOO LARGE')
STOP
4006 WRITE(IOUT,5006) NSYM
5006 FORMAT( ' NSYM =',15,' TOO LARGE')
STOP
4007 WRITE(IOUT,5007) III
5007 FORMAT( ' SYM ORB INDEX III =',15,' TOO LARGE')
STOP
4008 WRITE(IOUT,5008) KSIZ
5008 FORMAT( ' KSIZ =',15,' TOO LARGE — SMX AND FMX ARRAY IS INSUFFI
&CIENT')
STOP
4009 WRITE(IOUT,5009) ISYM,ISO,NSIZ
5009 FORMAT( ' NO. OF SYM ORB IN',14,'TH BLOCK IS',14,' AND NSIZ =',
&15,' — EIGN1 AND COE ARRAY IN EMERGE IS INSUFFICIENT')
STOP
4010 WRITE(IOUT,5010) I,NA,IATOM(NA)
5010 FORMAT(' IATOM ERROR ',315)
STOP
END

```

C*****

C SUBROUTINE PREPAR

C*****

```

SUBROUTINE PREPAR(NAOS,LVAL,MVAL,JVAL,JPRT,IOUT)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /ANGL/ MA1(#AZ ),MB1(#AZ ),MC1(#AZ ),MD1(#AZ ),ME1(#AZ ),
& MF1(#AZ ),LA1(#AZ ),LB1(#AZ ),LC1(#AZ ),LD1(#AZ ),LE1(#AZ )
COMMON /CLBS/ CLB1(#AZ ),CLB2(#AZ ),CLB3(#AZ ),CLB4(#AZ )
DIMENSION LVAL(*),MVAL(*),JVAL(*)
DATA D2/0.70710678118655D0/
DO 150 IA=1,NAOS
L=LVAL(IA)

```

```

J=JVAL(IA)
LS=L+1
IF(2*L.GE.J) LS=L-1
MMS=(MVAL(IA)-1)/2
MM=IABS(MMS)
M1S=(MVAL(IA)+1)/2
M1=IABS(M1S)
MXMM=2
MXM1=2
IF(MM.EQ.0) MXMM=1
IF(M1.EQ.0) MXM1=1
LL=L*(L+1)/2+MM+1
LL1=L*(L+1)/2+M1+1
LLS=LS*(LS+1)/2+MM+1
LLS1=LS*(LS+1)/2+M1+1
MA1(IA)=MM
MB1(IA)=M1
MC1(IA)=MMS
MD1(IA)=M1S
ME1(IA)=MXMM
MF1(IA)=MXM1
LD1(IA)=LS
LA1(IA)=LL
LC1(IA)=LL1
LB1(IA)=LLS
LE1(IA)=LLS1
MJ=MVAL(IA)
IF(MM.EQ.0) THEN
  CLB1(IA)=CLB(L,J,MJ,1)
  CLB3(IA)=CLB(LS,J,MJ,1)
ELSE
  CLB1(IA)=CLB(L,J,MJ,1)*D2
  CLB3(IA)=CLB(LS,J,MJ,1)*D2
ENDIF
IF(M1.EQ.0) THEN
  CLB2(IA)=CLB(L,J,MJ,-1)
  CLB4(IA)=CLB(LS,J,MJ,-1)
ELSE
  CLB2(IA)=CLB(L,J,MJ,-1)*D2
  CLB4(IA)=CLB(LS,J,MJ,-1)*D2
ENDIF
IF(JPRT.LT.2) GO TO 150
WRITE(IOUT,3001) IA,L,J,LS,MMS,M1S,MM,M1,MXMM,MXM1,LL,LL1,LLS,LLS1
WRITE(IOUT,3000) CLB1(IA),CLB2(IA),CLB3(IA),CLB4(IA)
150 CONTINUE
RETURN
3000 FORMAT('  CLB =',4D15.5)
3001 FORMAT('  L,J,LS =',16I5)

```

END

C*****

C SUBROUTINE PTGET

C*****

SUBROUTINE PTGET

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

CHARACTER*4 NSCF, NSCC, KSCF, QMOL, QGRD, TITLE, ANAME, IGL

COMMON /CHARCT/ NSCF, NSCC, KSCF, QMOL(10), QGRD, IGL,

& TITLE(4, #M), ANAME(10, #X)

COMMON /IOCNT/ IFL1, IFL2, IFL3, IFL4, IFL5, IFL6, IFL7, IFL8, ITSTR,

& INPUT, IOUT, IPUN, IEIG, ITP, IYL, ISAV, IEXPC, JPRT, JPUN

COMMON /PROCNT/ EXALF, XFAC, TL, RIDO, VIDO, TOLM, IDOA,

& KKK2, NCYCLE, NTABPT, NMAXK, NAT, NDAT, NCORE, NATOMS,

& NTYPES, NSYM, NAOS, NMOS, IIDO, LTIME, NNST, ITAPE,

& NTAPE, MAOS, MISOS, NSYMG, ITIME, ISYML(#M), JSYML(#M), NORB(#M)

COMMON /PROATM/ XVP(#HZ), YVP(#HZ), ZVP(#HZ), Z(#G), RO(#HZ),

& LMAXZ(#G), LMAXZS(#G), JMAXZ(#G), NEQP(#HZ), NEQ(#G)

COMMON /PRMESH/ RHS(#LZ, #X), RHO(#LZ, #X)

COMMON /PRAMO/ EIGNR(#EZZ), EIGNI(#EZZ), NPART(#EZZ),

& KAT(#AZ), MCOPT(#AZ), MVAL(#AZ), LVAL(#AZ), JVAL(#AZ),

& LOCA(#AZ), NBPT(#AZ)

COMMON /PROND/ ZN1(#X), DHD(#X), RS(#X), XALFA(#X),

& JCORE(#X), KMAX(#X), NIATOM(#X), NCO(#X), MSTAR(#X), KPLV(#X),

& INDEX(#X)

COMMON /ANGL/ MA1(#AZ), MB1(#AZ), MC1(#AZ), MD1(#AZ), ME1(#AZ),

& MF1(#AZ), LA1(#AZ), LB1(#AZ), LC1(#AZ), LD1(#AZ), LE1(#AZ)

COMMON /PDIST/ VECBAS(3), W1TAB(#G), TICK(#G), ALF(#G),

& BETA(#G), GAMMA(#G), R2(#HZ), YL(45, 2), YX(8, #AZ), KPL1(#HZ)

DATA PI, P8/3.14159265358979D0, 2.9542356553D0/

DATA AAZ/0.1D-6/

WRITE(IOUT, 2009)

READ(INPUT, 1002) (XVP(I), YVP(I), ZVP(I), NEQP(I), I=1, NATOMS)

READ(INPUT, 1003) EXALF

IF(DABS(EXALF).LT.AAZ) EXALF=0.7

XFAC=EXALF*P8

XFAC=XFAC/2.0

READ(INPUT, 1003) (VECBAS(I), I=1, 3)

IF(DABS(VECBAS(1)).LT.AAZ) VECBAS(1)=DSQRT(2.0D0)

IF(DABS(VECBAS(2)).LT.AAZ) VECBAS(2)=DSQRT(3.0D0)

IF(DABS(VECBAS(3)).LT.AAZ) VECBAS(3)=DSQRT(5.0D0)

DO 15 I=1, NAT

READ(INPUT, 1003) TICK(I), ALF(I), RO(I)

IF(DABS(TICK(I)-0.5D0).LT.0.8D-6) TICK(I) = TICK(I)+0.1D-5

BETA(I) = DEXP(-ALF(I)*RO(I))

W1 = TICK(I)

I2 = 1

IF(I.GT.I2) W1 = W1 - TICK(I-1)

GAMMA(I) = DLOG((1.0+BETA(I))/BETA(I))

```

      WITAB(I)=W1*ALF(I)/(4.0*PI*GAMMA(I))
15 CONTINUE
      IF(ITIME.GT.0) GO TO 275
      WRITE(IOUT,2006)
      DO 270 I=1,NATOMS
      IF(NEQP(I).EQ.0) NEQP(I)=I
      NQ=NEQP(I)
      WRITE(IOUT,2010) XVP(I),YVP(I),ZVP(I),ANAME(1,NQ)
      IF(I.GT.NAT) GO TO 270
      WRITE(IOUT,2012) TICK(I),ALF(I),RO(I)
270 CONTINUE
      WRITE(IOUT,2011) (VECBAS(I),I=1,3)
      IF(JPRT.LE.0) GO TO 275
      WRITE(IOUT,2013) (I,BETA(I),GAMMA(I),WITAB(I),I=1,NAT)
275 CONTINUE
      DO 280 ND=1,NDAT
      DO 277 IA=1,NAT
      NQ=NEQ(IA)
      IF(NQ.EQ.ND) GO TO 278
277 CONTINUE
278 DO 279 K=1,NTABPT
      IF(RHS(K,ND)-RO(IA).LT.AAZ) KPLV(ND)=K
279 CONTINUE
280 CONTINUE
      REWIND ITP
      IF(ITAPE.GE.2) WRITE(IOUT,3001) ITAPE
3001 FORMAT(' ITAPE =',I5,' ASSUME DV-POINTS ARE ALREADY IN ITP')
      IF(ITAPE.GE.2) RETURN
      CALL SOBOL(0,VECBAS)
      NN=0
      DO 250 NN1=1,NMAXK
      NN = NN + 1
      CALL DVPT(NN,NAT,I1,XP,YP,ZP,TICK,GAMMA,BETA,XVP,YVP,ZVP,
& ALF,VECBAS)
      DEN = 0.0
      DO 130 I=1,NATOMS
      NQ = NEQP(I)
      KK = KMAX(NQ)
      XV=XP-XVP(I)
      YV=YP-YVP(I)
      ZV=ZP-ZVP(I)
      RNUS=XV**2+YV**2+ZV**2
      RNU = DSQRT(RNUS)
      R2(I)=RNU
      JJ=I
      CALL KPLGET(NTABPT,NAT,JJ,RNU,RO(JJ),KPLV(NQ),KPL1(JJ),RHS(1,NQ))
      IF( I.GT.NAT ) GO TO 130
      DEN = DEN + WITAB(I)/(RNUS*(1.0+DEXP(-ALF(I)*(RO(I)-RNU))))

```

```

      IF( RNU.LT.RS(NQ) ) GO TO 50
      DO 20 IA = 1,NAOS
      IF( LOCA(IA).NE.1 ) GO TO 20
      DO 18 J=1,8
18  YX(J, IA)=0.0D0
20  CONTINUE
      GO TO 130
50  NLAB = LMAXZ(1)
      IF(LMAXZS(1).GT.NLAB) NLAB=LMAXZS(1)
      CALL YLMGET(RNU,XV,YV,ZV,NLAB,YL)
      CALL DHARM(JJ,MA1,MB1,MC1,MD1,ME1,MF1,LVAL,LA1,LB1,LC1,
& LD1,LE1,YL,YX,LOCA,NAOS)
130 CONTINUE
      WRITE(1TP)DEN, (R2(1),KPL1(1), I=1,NATOMS), ((YX(I,J), I=1,8),
& J=1,NAOS)
      IF(NMAXK.GT.5) GO TO 135
      WRITE(1OUT,2014) DEN,XP,YP,ZP, (R2(1),KPL1(1), I=1,NATOMS)
      WRITE(1OUT,2008) ((YX(I,J), I=1,8),J=1,NAOS)
2008 FORMAT('  YX =',(10D13.5))
135 CONTINUE
250 CONTINUE
      RETURN
1002 FORMAT(3D20.10,15)
1003 FORMAT(3D20.10)
2006 FORMAT(10X,'ATOM POSITIONS IN THE CLUSTER(A.U.)'/7X,'X',
&12X,'Y',12X,'Z',11X,'TICK',9X,'ALF',11X,'RO',10X,'ATOM'/)
2009 FORMAT( /10X,'AT THE BEGINING OF PTGET' )
2010 FORMAT(3F13.5,45X,A4,' USE POTENTIAL')
2011 FORMAT(10X,'VECBAS =',3D20.10)
2012 FORMAT(1H+,39X,3F13.5,27X,' AND WAVE FUNCTIONS')
2013 FORMAT(10X,'BETA,GAMMA,WITAB'/(15,3D20.10))
2014 FORMAT('  DEN,X,Y,Z,(R,KPL) =',4D15.3/7(D13.5,15))
      END
C*****
C  SUBROUTINE KPLGET
C*****
      SUBROUTINE KPLGET(KK,NAT,I,RNU,RO,KPLV,KPL1,RHS)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION RHS(*)
      DO 180 K=1,KK
      IF(RHS(K).LT.RNU) GO TO 180
      KPL=K
      GO TO 190
180 CONTINUE
190 IF(KPL.GT.(KK-2)) KPL=KK-2
      IF(KPL.LE.3) then
          write(*,*) ' *** Warning - NoGood DV point has been generated'
          write(*,*) '      Rnu,RHS(1),KPL = ',Rnu,RHS(1),KPL
      end if

```



```

write(*,*) ' ** Larger number of mesh points is recommended.'
IF(KPL.LE.1) then
write(*,*) ' *** Error(KPLGET) Rnu too small'
write(*,*) ' ** Larger number of mesh points is required.'
stop
endif
KPL=4
endif

```

```

IF(1.GT.NAT) GO TO 125
IF(RO.GE.RHS(KPL-3).AND.RO.LT.RNU)
& KPL=KPLV+4
IF(RO.LT.RHS(KPL+2).AND.RO.GE.RNU)
& KPL=KPLV-2
125 CONTINUE
KPL1=KPL
RETURN
END

```

```

C*****
C SUBROUTINE DHARM
C*****

```

```

SUBROUTINE DHARM(I, MA1, MB1, MC1, MD1, ME1, MF1, LVAL, LA1, LB1, LC1,
& LD1, LE1, YL, YX, LOCA, NAOS)
IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
DIMENSION MA1(*), MB1(*), MC1(*), MD1(*), ME1(*), MF1(*), LVAL(*),
& LA1(*), LB1(*), LC1(*), LD1(*), LE1(*), YL(45, 2), YX(8, #AZ ), LOCA(*)
DO 150 IA=1, NAOS
IF(LOCA(IA).NE.1) GO TO 150
MM=MA1(IA)
M1=MB1(IA)
MXMM=ME1(IA)
MXM1=MF1(IA)
MMS=MC1(IA)
M1S=MD1(IA)
L=LVAL(IA)
LS=LD1(IA)
LL=LA1(IA)
LL1=LC1(IA)
LLS=LB1(IA)
LLS1=LE1(IA)
YX(1, IA)=YL(LL, 1)
YX(2, IA)=YL(LL1, 1)
YX(3, IA)=YL(LLS, 1)
YX(4, IA)=YL(LLS1, 1)
IF(MXMM.EQ.1) THEN
YX(5, IA)=0.D0
YX(7, IA)= 0.D0
ELSE

```

```

    YX(5, IA)=YL(LL, MXMM)
    YX(7, IA)=YL(LLS, MXMM)
ENDIF
IF(MXM1.EQ.1) THEN
    YX(6, IA)= 0.D0
    YX(8, IA)= 0.D0
ELSE
    YX(6, IA)=YL(LL1, MXM1)
    YX(8, IA)=YL(LLS1, MXM1)
ENDIF
IF(MM.GT.L) YX(1, IA)=0.D00
IF(M1.GT.L) YX(2, IA)=0.D00
IF(MM.GT.LS) YX(3, IA)=0.D00
IF(M1.GT.LS) YX(4, IA)=0.D00
IF(MM.GT.L) YX(5, IA)=0.D00
IF(M1.GT.L) YX(6, IA)=0.D00
IF(MM.GT.LS) YX(7, IA)=0.D00
IF(M1.GT.LS) YX(8, IA)=0.D00
150 CONTINUE
RETURN
END

```

C*****

C SUBROUTINE YLMGET

C*****

```

SUBROUTINE YLMGET(RNU, XZ, YZ, ZZ, NLAB, YL)
IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
DIMENSION YL(45, 2)
DATA PI/3.14159265358979D0/
DIST=RNU
PHI = 0.0
ZMU = 0.0
IF( DIST.GT.1.0E-03) GO TO 72
DIST = 0.0
GO TO 100
72 ZMU = ZZ/DIST
RXY = XZ**2 + YZ**2
IF( RXY.LT.1.0E-06 ) GO TO 100
RXY = DSQRT(RXY)
YY = YZ/RXY
IF( DABS(YY).LT.1.0E-06) GO TO 80
IF( DABS(YY).GT.1.0D00) YY=1.0D00
PHI=DASIN(YY)
GO TO 90
80 PHI = 0.0
90 IF(XZ.GE.0.0) GO TO 100
PHI = PI - PHI
100 CALL ALM1(NLAB, ZMU, PHI, YL)
RETURN

```

END

C*****

C SUBROUTINE DVPT

C*****

SUBROUTINE DVPT (NN, NAT, I1, XP, YP, ZP, TICK, GAMMA, BETA, XVP, YVP, ZVP,
& ALF, VECBAS)

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

COMMON /IOCNT/ IFL1, IFL2, IFL3, IFL4, IFL5, IFL6, IFL7, IFL8, ITSTR,
& INPUT, IOUT, IPUN, IEIG, ITP, IYL, ISAV, IEXPC, JPRT, JPUN

DIMENSION TICK(*), GAMMA(*), BETA(*), XVP(*), YVP(*), ZVP(*), XII(3),
& ALF(*), VECBAS(3)

DATA PI/3.14159265358979D0/

CALL SOBOL(3, XII)

PSI1 = XII(1)

CSTH1 = 2.0*XII(2) - 1.D0

PH1 = 2.0*PI*XII(3)

DO 70 I=1, NAT

IF(PSI1.GE. TICK(I)) GO TO 70

I1 = I

GO TO 71

70 CONTINUE

WRITE(IOUT, 2007) PSI1

STOP

71 CONTINUE

TIL = 0.0

I2 = 1

IF(I1.GT. I2) TIL = TICK(I1-1)

PSI1 = (PSI1-TIL)/(TICK(I1)-TIL)

X5P = DEXP(GAMMA(I1)*PSI1)

X5M = 1.0 + BETA(I1)*(1.0-X5P)

R1 = DLOG(X5P/X5M)/ALF(I1)

ZP = R1*CSTH1

R1S = DSQRT(R1*R1 - ZP*ZP)

XP=R1S* DCOS(PH1)+XVP(I1)

YP=R1S* DSIN(PH1)+YVP(I1)

ZP=ZP+ZVP(I1)

RETURN

2007 FORMAT(' PSI1 =', D20.10, ' NOT SATISFIED IN DVPT')

END

C*****

C SUBROUTINE ALM1

C*****

SUBROUTINE ALM1 (LMAX, Z, PHI, YL)

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

COMMON /IOCNT/ IFL1, IFL2, IFL3, IFL4, IFL5, IFL6, IFL7, IFL8, ITSTR

DIMENSION YL(45, 2)

DATA PI4/12.56637061435616D0/, PI2/6.28318530717958D0/

DATA Y0, ZERO, ONE/.282094791773878D0, 0.D0, 1.D0/

```

    INTEGER U
    U=0
    YL(1,2)=ZERO
    YL(1,1)=Y0
    IF (LMAX.EQ.0) RETURN
    X=DSQRT(ONE-Z*Z)
    SINPHI=DSIN(PHI)
    COSPHI=DCOS(PHI)
    SINMP=ZERO
    COSMP=ONE
    PMM=ONE
    FAC=ONE
    ISUB=1
    MFAC2=0
    MFAC=1
    DO 30 M=U, LMAX
    IF (M.EQ.0) GO TO 5
    FAC=FAC/DFLOAT(MFAC*MFAC2)
    PMM=-PMM*DFLOAT(MFAC)*X
    COSTP=COSMP*COSPHI-SINMP*SINPHI
    SINMP=SINMP*COSPHI+COSMP*SINPHI
    COSMP=COSTP
    FAC1=FAC/PI2
    MFAC=MFAC+2
    YL1=PMM*DSQRT(FAC1*DFLOAT(MFAC))
    YL(ISUB,1)=YL1*COSMP
    YL(ISUB,2)=YL1*SINMP
    IF (M.EQ.LMAX) RETURN
    GO TO 10
5  FAC1=FAC/PI4
10 ISUB1=ISUB+M+1
    ISUB=ISUB1+1
    LFAC=MFAC
    PLM=PMM
    MFAC2=MFAC2+2
    M1=M+1
    DO 25 L=M1, LMAX
    LM=L-M
    LP=L+M
    PLM1=PLM*Z*DFLOAT(LFAC)
    LFAC=LFAC+2
    IF (L.EQ.M1) GO TO 15
    PLM1=PLM1-DFLOAT(LP-1)*PLM0
15 PLM1=PLM1/DFLOAT(LM)
    IF (M.EQ.0) GO TO 20
    FAC1=DFLOAT(LM)*FAC1/DFLOAT(LP)
20 YL1=DSQRT(DFLOAT(LFAC)*FAC1)*PLM1
    YL(ISUB1,1)=YL1*COSMP

```

```

YL (ISUB1, 2)=YL1*SINMP
PLMO=PLM
PLM=PLM1
25 ISUB1=ISUB1+L+1
30 CONTINUE
RETURN
END

```

```

C*****
C SUBROUTINE ATCALC
C*****

```

```

SUBROUTINE ATCALC
IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
COMMON /IOCNT/ IFL1, IFL2, IFL3, IFL4, IFL5, IFL6, IFL7, IFL8, ITSTR,
& INPUT, IOUT, IPUN, IEIG, ITP, IYL, ISAV, IEXPC, JPRT, JPUN
COMMON /PROND/ ZN1 (#X), DHD (#X), RS (#X), XALFA (#X),
& JCORE (#X), KMAX (#X), NIATOM (#X), NCO (#X), MSTAR (#X), KPLV (#X),
& INDEX (#X)
COMMON /PROCNT/ EXALF, XFAC, TL, RIDO, VIDO, TOLM, IDOA,
& KKK2, NCYCLE, NTABPT, NMAXK, NAT, NDAT, NCORE, NATOMS,
& NTYPES, NSYM, NAOS, NMOS, IIDO, LTIME, NNST, ITAPE,
& NTAPE, MAOS, MISOS, NSYMG, ITIME, ISYML (#M), JSYML (#M), NORB (#M)
COMMON /PRMESH/ RHS (#LZ, #X), RHO (#LZ, #X)
COMMON /NATC/ IATC (#X), IATD
DIMENSION JATCH (#X)
DIMENSION RH (#LZ)

```

```

COMMENT DOUBLE P4
DATA P4/12.56637061436D0 /
WRITE (IOUT, 4)
IF (ITIME.EQ. 10) RETURN
READ (INPUT, 1) (JATCH (I), I=1, NTYPES)
DO 10 ND=1, NTYPES
IF (JATCH (ND).EQ.0) GO TO 10
IATD=0
IF (IATC (ND).EQ.1) IATD=1
WRITE (IOUT, 2) ND
CALL ATCHCL (KMAX (ND), ZN1 (ND), DHD (ND), XALFA (ND), RHO (1, ND),
& RHS (1, ND))
DO 5 K=1, NTABPT
5 RH (K)=P4*RHS (K, ND)**2*RHO (K, ND)
WRITE (IPUN, 6) (RH (K), K=1, NTABPT)
10 CONTINUE
WRITE (IOUT, 3)
RETURN
1 FORMAT (16I5)
2 FORMAT (' ATOM CHARGE FOR ATOM', I3)
3 FORMAT (5X, ' ATOM CHARGE CALC. END ')
4 FORMAT (' AT THE BEGINING OF ATCALC')
6 FORMAT (5D14.7)

```

```

END
C SUBROUTINE WELPOT FOR EXTENDED BASE CREATION
  SUBROUTINE WELPOT ( IDOA, VBAR, RAD, AA, BB, VR, RBAR)
    IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
    COMMON /WELSHP/ RNBR, VNBR
    GOTO (10,20), IDOA
10 IF( RAD.LE.RBAR ) RETURN
   VR=VR+AA
   RETURN
20 IF( RAD.LE.RBAR ) RETURN
   VR=VR+BB*RAD**2-2.ODO*RAD*VBAR
   RETURN
  END
C*****
C SUBROUTINE ATCHCL
C*****
  SUBROUTINE ATCHCL (N, ZN, H, XALPH, RH, RAD)
    IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
    PARAMETER (NwC=#C )
    COMMON /IOCNT/ IFL1, IFL2, IFL3, IFL4, IFL5, IFL6, IFL7, IFL8, ITSTR,
    & INPUT, IOUT, IPUN, IEIG, ITP, IYL, ISAV, IEXPC, JPRT, JPUN
    COMMON /CATCNT/ PHM, TOLE, DEL, TOL1, REMV1, REMV2, REMV3,
    & LITERN, ICYCLE, IWRE, NDWAV, NDVR, NMAX, IPOP, JLV1, JLV2, JLV3,
    & LSY1, LSY2, LSY3
    COMMON /NATC/ IATC(#X), IATD
    COMMON /PROGNT/ EXALF, XFAC, TL, RIDO, VIDO, TOLM, IDOA,
    & KKK2, NCYCLE, NTABPT, NMAXK, NAT, NDAT, NCORE, NATOMS,
    & NTYPES, NSYM, NAOS, NMOS, IIDO, LTIME, NNST, ITAPE,
    & NTAPE, MAOS, MISOS, NSYMG, ITIME, ISYML(#M), JSYML(#M), NORB(#M)
    COMMON / / EPS, RBAR, VBAR, H3, HA1, HA2, HA3, HA4, HA5, HA6, HA7, HA8, HA9,
    & FDLL, FN, FL, E, RN, VOC(5), DA(5), DB(5), A0(15), B0(15), Y(#LZ),
    & FJ, VO, FK, CS, G, Q11, Q22, TCS, NDEBU
    DIMENSION RH(N), RAD(N), A(#LZ), VR(#LZ), XN(NwC), XL(NwC)
    DIMENSION XJ(NwC), B(#LZ), XE(NwC), XZ(NwC)
    DATA CONST, THIRD/1.47711753277D0, 0.3333333333333D0/
    DATA P4/12.56637061436D0/
    DATA AAZ, ABZ, ACZ, ADZ/.0D0, .1D1, .1D-3, .8D0/
    DATA AZZ/0.1D-6/
    READ( INPUT, 101) J, NC1
    READ( INPUT, 102) DELVR, RBAR1, VBAR1, PH, PHI
    READ( INPUT, 103) (XN(I), XL(I), XJ(I), XE(I), XZ(I), I=1, J)
    IF( IATD.EQ.0) RETURN
    IF( NC1.EQ.0) NC1=30
    NNN=N
    IF( DABS(DELVR).LT.AZZ) DELVR=ACZ
    IF( DABS(PH).LT.AZZ) PH=ADZ
    IF( DABS(PHI).LT.AZZ) PHI=ADZ
    IF( DABS(RBAR1).LT.AZZ) VBAR2=AAZ

```

```

      IF(DABS(RBAR1).LT.AZZ) RBAR1=ABZ
      WRITE(IOUT,201) RBAR1, VBAR1, IDOA
201  FORMAT(' WELL POTENTIAL R=',D15.5,' V=',D15.5,' IDOA=',I3 )
      AA=RBAR1*VBAR1
      BB=-VBAR1/RBAR1
      DEL=. 1E-6
      LAST=0
      CONTT=CONST*XALPH
      RN=RAD(N)
      NCYCL=NC1
      CONVR=AAZ
      do 30 i=1,N
30   VR(i)=0.0d0
      3 CONVR1=CONVR
      CALL CLPOT(RH, RAD, ZN, NNN, A, H)
      NERRO=0
      EPSLO=AAZ
      DO 6 K=1, N
          RV=(A(K)-SIGN(1.DO, RH(K))*CONTT*ABS(RH(K))**THIRD)*RAD(K)
          IF(RAD(K)-RBAR1.LT.AZZ) THEN
              RV=RV+RAD(K)*VBAR1
          ELSE
              IF(IDOA.GE.1) CALL WELPOT(IDOA, VBAR1, RAD(K), AA, BB, RV, RBAR1)
          ENDIF
          ERROR=DABS(RV-VR(K))
          IF(EPSLO-ERROR.GT.AZZ) GO TO 5
          EPSLO=ERROR
          NERRO=K
5     VR(K)=RV
      RH(K)=RH(K)*RAD(K)**2*P4
      6 CONTINUE
      CONVR=DABS(EPSLO)
      CALL SINPT(VR, RAD, NNN, ZN, H)
      VBAR=VBAR1
      RBAR=RBAR1
      IF(DELVR-CONVR.LT.AZZ) GO TO 9
      LAST=1
      9 PS=ABZ-PH
      DO 10 K=1, N
10   RH(K)=PS*RH(K)
      DO 13 I=1, J
          FN=XN(I)
          FL=XL(I)
          FJ=XJ(I)
          E=XE(I)
          CALL DIDIF(VR, RAD, NNN, ZN, A, B, H)
          XE(I)=E
      DO 11 K=1, N

```

```

11 RH(K)=RH(K)+PH*XZ(1)*(A(K)**2+B(K)**2)
13 CONTINUE
   DO 14 K=1,N
14 RH(K)=RH(K)/RAD(K)**2/P4
   IF(CONVR.GT.CONVR1) PH=PH*PHI
   IF(LAST.EQ.1) GO TO 15
   NCYCL=NCYCL-1
   IF(NCYCL.LE.0) LAST=1
   GO TO 3
15 CONTINUE
   IF(JPRT.GE.2) WRITE(IOUT,112)(RAD(K),RH(K),K=1,N,JPRT)
112 FORMAT('  ATOMIC CHARGE'/(10D13.6))
   WRITE(IOUT,104) NCYCL,CONVR,NERRO,PH
   IF(NCYCL.EQ.0) STOP
   RETURN
101 FORMAT(16I5)
102 FORMAT(8F10.5)
103 FORMAT(3F5.1,2F12.6)
104 FORMAT(/5X,'NCYCL,CONVR,NERRO,PH',5X,I5,D10.3,I5,F10.5)
END

```

```

C*****
C  SUBROUTINE CLPOT
C*****

```

```

SUBROUTINE CLPOT(RHO,RAD,ZN,N,VH,H)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON /IOCNT/ IFL1,IFL2,IFL3,IFL4,IFL5,IFL6,IFL7,IFL8,ITSTR,
& INPUT,IOUT,IPUN,IEIG,ITP,IYL,ISAV,IEXPC,JPRT,JPUN
COMMON / / C(#LZ),D(#LZ),DA(5),DB(5)
DIMENSION RHO(#LZ),RAD(#LZ),VH(N)
DATA AAZ,ABZ,ACZ/.1D1,.4D1,.3D1/
DATA P4/0.0795774715D0/
H3=H/ACZ
S2=DLOG(RHO(2)/RHO(1))/H+AAZ+AAZ
S3=S2+AAZ
DO 1001 K=1,2
R=RAD(K)
C(K)=RHO(K)*R*R/S3/P4*R
D(K)=RHO(K)*R/S2/P4*R
DB(K)=H3*RHO(K)*R/P4*R
1001 DA(K)=DB(K)*R
DO 1 K=3,N
R=RAD(K)
DB(3)=H3*RHO(K)*R/P4*R
DA(3)=DB(3)*R
C(K)=C(K-2)+DA(3)+ABZ*DA(2)+DA(1)
D(K)=D(K-2)+DB(3)+ABZ*DB(2)+DB(1)
DA(1)=DA(2)
DB(1)=DB(2)

```



```

    DA(2)=DA(3)
    1 DB(2)=DB(3)
      BN=D(N)
      DO 17 K=1,N
        VH(K)=(C(K)-ZN)/RAD(K)+BN-D(K)
    17 CONTINUE
      RETURN
      END

```

C*****

C SUBROUTINE SINPT

C*****

```

SUBROUTINE SINPT(VR, RAD, N, ZN, H)
  IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
  COMMON /IOCNT/ IFL1, IFL2, IFL3, IFL4, IFL5, IFL6, IFL7, IFL8, ITSTR,
& INPUT, IOUT, IPUN, IEIG, ITP, IYL, ISAV, IEXPC, JPRT, JPUN
  COMMON /CATCNT/ PHM, TOLE, DEL, TOL1, REMV1, REMV2, REMV3,
& LITERN, ICYCLE, IWRE, NDWAV, NDVVR, NMAX, IPOP, JLV1, JLV2, JLV3,
& LSY1, LSY2, LSY3
  COMMON / / EPS, RBAR, VBAR, H3, HA1, HA2, HA3, HA4, HA5, HA6, HA7, HA8, HA9,
& FDLL, FN, FL, E, RN, VOC(5), DA(5), DB(5), AO(15), BO(15), Y(#LZ),
& FJ, VO, FK, CS, G, Q11, Q22, TCS, NDEBU
  DIMENSION VR(N), RAD(N)
  DATA CL/137.037D0/
  DATA AAA, CCC, DDD, EEE, FFF, GGG, HHH, PPP, QQQ, RRR, SSS, TTT/
& .0D0, .25D4, .3D1, .8D1, .1125D1, .2375D1, .625D0, .125D0,
& .24D3, .12D3, .8D2, .6D2/
  RN=RAD(N)
  EPS=CCC
  RBAR=TTT
  VBAR=AAA
  NDEBU=0
  H3=H/DDD
  HA1=EEE*H3
  HA2=FFF*H3
  HA3=GGG*H3
  HA4=HHH*H3
  HA5=PPP*H3
  HA6=H3/QQQ
  HA7=H3/RRR
  HA8=H3/SSS
  HA9=H3/TTT
  FDLL=AAA
  RA=RAD(1)
  RB=RAD(2)/RA
  RC=RAD(3)/RA
  VOC(1)=-ZN
  VOC(2)=AAA
  TA=(VR(1)+ZN)

```

```
TB=(VR(2)+ZN)/RB
TC=(VR(3)+ZN)/RC
RA=.1D1
DETA=RB*RC*(RC-RB)
DETB=RA*RC*(RA-RC)
DETC=RA*RB*(RB-RA)
DET=DETA+DETB+DETC
VOC(5)=(TA*DETA+TB*DETB+TC*DETC)/DET
DETA=RA*RA
DETB=RB*RB
DETC=RC*RC
VOC(3)=(TA*(DETB-DETC)+TB*(DETC-DETA)+TC*(DETA-DETB))/DET
VOC(4)=(TA*(RC-RB)+TB*(RA-RC)+TC*(RB-RA))/DET
DO 10 I=1,5
10 VOC(I)=-VOC(I)/CL
RETURN
END
```