

Apéndice A

a) Programa para calcular los tensores  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ . (POLA)

El programa POLA ha sido estructurado para calcular los coeficientes tensoriales que forman parte de la expresión del momento dipolar de una molécula, cuando esta interactúa con la radiación [ec. (16), cap. 8, inciso  $c_1$ ]].

Se han considerado solamente los primeros seis estados singuletes excitados y la interacción de configuraciones (utilizada en los cálculos previos) se extendió a cuarenta. Así mismo, el número de átomos presentes en la molécula se limitó a veinte, con sesenta posibles orbitales ocupados y desocupados. Todas estas dimensiones pueden, sin embargo, y en caso de desearlo, ser modificadas, aún cuando un número mayor en cualquiera de ellas extendería demasiado el tiempo de máquina.

La impresión fue pensada para poder representar las componentes tensoriales en función de las frecuencias, razón por la cual los resultados aparecen por molécula y por estado. En una etapa posterior se introducirán las sentencias necesarias, en forma de opción, para que el mismo programa realice la representación gráfica, así como para que los datos puedan ser leídos de distintas maneras (cinta, disket, etc.).

La nomenclatura para las distintas magnitudes se indica en los comentarios previos al programa, lo mismo que los distintos pesos del cálculo, a medida que estos se verifican.

El lenguaje utilizado ha sido el FORTRAN, debido a la flexibilidad que presenta, siendo una de sus cualidades la dimensión matricial. El número de subíndices ha sido optimizado, siendo esto posible por la simetría de las matrices y por las condiciones físicas impuestas a los cálculos, lo cual permitió una disminución drástica del tiempo de máquina a usar.

Los datos necesarios deben ser calculados previamente mediante cualquier programa que permita la obtención de orbitales moleculares y de configuraciones de base. En este trabajo se utilizó para ello el método CNDO/M-SCF-CI, de Jaffe-DeIbene, eligiéndose las opciones adecuadas, por considerar que el tamaño de las moléculas imponía un método semi-empírico. En el caso de moléculas pequeñas, sin embargo, es posible utilizar alguno de los métodos "ab-initio", aún cuando, en nuestra opinión, al estar pensado el programa para realizar aproximaciones sería inútil cualquier mejora, referida a exactitud, en lo que hace al banco de datos.

C CON EM SE INDICAN MOMENTOS ELECTRICOS  
 C CON AM LAS DERIVADAS EN LOS MOMENTOS MAGNETICOS  
 C CON BM LOS TERMINOS MAGNETICOS  
 C CON B1 LOS TERMINOS MAGNETICOS YA COMPLETOS  
 C CON COM Y CAM SE INTRODUCEN PRODUCTOS ELECTRICOS Y MAGNETICOS  
 C CON COEF LOS COEFICIENTES ORBITALES  
 C CON COFA LOS COEFICIENTES DE LAS CONFIGURACIONES  
 C CON EPSI LAS ENERGIAS ORBITALES  
 C CON ENE LOS NIVELES SINGULETES  
 C CON X(I,J) LAS COORDENADAS DE LOS ATOMOS EN LA MOLECULA  
 C CON IAF(I) LOS NIVELES OCUPADOS EN LAS CONFIGURACIONES  
 C CON IE(I) LOS NIVELES FINALES  
 C CON N EL NUMERO DE ORBITALES MOLECULARES OCUPADOS Y DESOCUPADOS  
 C CON NATOM EL NUMERO DE ORBITALES ATOMICOS EN CADA ORBITAL MOLECULAR  
 C CON NV EL NUMERO DE SINGULETES ESTUDIADOS  
 C CON NB EL NUMERO DE CONFIGURACIONES EN CADA SINGULETE  
 C CON NC EL NUMERO DE SINGULETES  
 C CON ND EL NUMERO DE ENERGIAS EN CADA SINGULETE  
 C CON NE EL NUMERO DE ENERGIAS ORBITALES  
 C CON NAT EL NUMERO DE ATOMOS  
 C CON AFRA(K) LAS ENERGIAS DE BARRIDO  
 C CON NAND EL NUMERO DE ENERGIAS DE BARRIDO  
 C CON TITU EL NOMBRE DE LA MOLECULA Y LA FORMA TAUTOMERICA  
 DIMENSION COEF(60,60),COFA(60,60),EPSI(60),ENE(60),X(3,20),IAF(60)  
 DIMENSION IE(60),EM(3),AM(3),EMX(60,60),EMY(60,60),EMZ(60,60)  
 DIMENSION AMX(60,60),AMY(60,60),AMZ(60,60),BMYZ(6,60),BMZY(6,60)  
 DIMENSION BMZX(6,60),BMXZ(6,60),BMXY(6,60),BMYX(6,60),B1YZX(6,60)  
 DIMENSION B1ZXY(6,60),B1XYZ(6,60),AEMXX(6,4),AEMXY(6,4),AEMXZ(6,4)  
 DIMENSION AEMYY(6,4),AEMYZ(6,4),AEMZZ(6,4),CMXX(6,4),CMXY(6,4)  
 DIMENSION CMZZ(6,4),CMXZ(6,4),CMYY(6,4),CMYZ(6,4),COMXX(6,4),ET(6)  
 DIMENSION COMXY(6,4),COMXZ(6,4),COMYY(6,4),COMYZ(6,4),COMZZ(6,4)  
 DIMENSION CAMXX(6,4),CAMXY(6,4),CAMXZ(6,4),CAMYY(6,4),CAMYZ(6,4)  
 DIMENSION CAMZZ(6,4),COT(6,4),CAT(6,4)  
 DIMENSION SEMXX(6,60),SEMY(6,60),SEMZZ(6,60),CTM(6,4)  
 DIMENSION SAMXX(6,60),SAMY(6,60),SAMZZ(6,60),IATOM(60),CTE(6,4)  
 DIMENSION SX(6),SY(6),SZ(6),AFRA(60),COE2(60,60,60),TITU(20)  
 =514 CONTINUE  
 READ 700,TITU  
 700 FORMAT(20A4)  
 READ 1,N,NA,NATOM,NV,NB,NC,ND,NE,NAT,INDU,NAND  
 1 FORMAT(11I4)  
 W=1-INDU  
 READ 2,((COEF(I,J),J=1,NATOM),I=1,N)

```

READ 2, ((COFA(I, J), J=1, NB), I=1, NC)
READ 2, (EPSI(I), I=1, NE)
READ 2, (ENE(I), I=1, ND)
READ 4, (IAF(I), I=1, NB)
READ 4, (IE(I), I=1, NB)
READ 4, (IATOM(I), I=1, NATOM)
READ 2, (AFRA(I), I=1, NAND)
2 FORMAT(8F10.0)
4 FORMAT(20I4)
READ 333, (X(1, J), X(2, J), X(3, J), J=1, NAT)
333 FORMAT(3F10.0)
DO 235 I=1, NC
235 COFA(I, J)=0.
DO 236 J=2, NB
236 COFA(I, J)=0.
COFA(1, 1)=1.
DO 660 I=1, 3
DO 660 J=1, NAT
660 X(I, J)=X(I, J)/0.528
DO 661 I=1, NE
661 EPSI(I)=EPSI(I)/27.204
DO 662 I=1, ND
662 ENE(I)=ENE(I)/27.204
EP=137.037/3.1416
ANV=1./6.2832
ANT=ANV/3.
PI=6.2832*6.2832
BAR=1./(2.*137.037)
BAL=2./3.
CU=1./3.
DO 515 K=1, NATOM
DO 515 J=1, N
DO 515 I=1, N
515 COE2(I, J, K)=COEF(I, K)*COEF(J, K)
C COMIENZA EL CALCULO DE MOMENTOS ELECTRICOS
DO 10 IA=1, NV
DO 10 JA=1, NC
DO 25 I=1, 3
EM(I)=0.
IF(IA.EQ.1)GO TO 200
DO 12 I2=1, NB
DO 12 I3=1, NB
COPA=COFA(IA, I2)*COFA(JA, I3)

```

```

IF(I2.EQ.I3)GO TO 20
IF(IAF(I2).EQ/IAF(I3))GO TO 19
GO TO 18
19 L1=IE(I2)
L2=IE(I3)
GO TO 21
18 IF(IE(I2).NE.IE(I3))GO TO 12
L1=IAF(I2)
L2=IAF(I3)
21: CONTINUE
DO 22 I5=1,NATOM
JAI=IATOM(I5)
22 EM(I)=EM(I)+COE2(L1,L2,I5)*X(I,JAI)*COPA
GO TO 12
20: CONTINUE
DO 25 I6=1,NA
DO 26 I7=1,NATOM
JAI=IATOM(I7)
26 EM(I)=EM(I)+2.*COE2(I6,I6,I7)*X(I,JAI)*COPA
DO 27 I8=1,NATOM
JAI=IATOM(I8)
LA=IAF(I2)
LB=IE(I2)
EM(I)=EM(I)-COE2(LA,LA,I8)*X(I,JAI)*COPA
EM(I)=EM(I)+COE2(LB,LB,I8)*X(I,JAI)*COPA
27 CONTINUE
12 CONTINUE
GO TO 40
200 CONTINUE
IF(IA.NE.JA)GO TO 77
DO 46 I6=1,NA
DO 46 I7=1,NATOM
JAI=IATOM(I7)
46 EM(I)=EM(I)+2.*COE2(I6,I6,I7)*X(I,JAI)
GO TO 40
77 DO 30 IN=2,NC
DO 30 IC=2,NB
LA=IAF(IC)
LB=IE(IC)
DO 30 I9=1,NATOM
JAI=IATOM(I9)
30 EM(I)=EM(I)+COE2(LA,LB,I9)*X(I,JAI)*COFA(IN,IC)
40 CONTINUE

```

25 CONTINUE

EMX(IA,JA)=EM(1)

EMY(IA,JA)=EM(2)

EMZ(IA,JA)=EM(3)

10 CONTINUE

DO 50 IA=1,NV

DO 50 JA=1,NC

EMX(JA,IA)=EMX(IA,JA)

EMY(JA,IA)=EMY(IA,JA)

EMZ(JA,IA)=EMZ(IA,JA)

50 CONTINUE

C COMIENZA MOMENTOS MAGNETICOS DERIVADAS

DO 100 IA=1,NV

DO 100 JA=1,NC

DO 125 I=1,3

AM(I)=0.

IF(IA.EQ.1)GO TO 250

DO 112 I2=1,NB

DO 112 I3=1,NB

COPA=COFA(IA,I2)\*COFA(JA,I3)

IF(I2.EQ.I3)GO TO 120

IF(IAF(I2).EQ.IAF(I3))GO TO 119

GO TO 118

119 L1=IE(I2)

L2=IE(I3)

GO TO 121

118 IF(IE(I2).NE.IE(I3))GO TO 112

L1=IAF(I2)

L2=IAF(I3)

121 CONTINUE

FACTO=PI\*(EPSI(L1)-EPSI(L2))

DO 222 IS=1,NATOM

JAI=IATOM(IS)

122 AM(I)=AM(I)-COE2(L1,L2,IS)\*X(I,JAI)\*COPA\*FACTO

GO TO 112

120 CONTINUE

ANA=NA

AM(I)=AM(I)+ANA\*ANT\*BAR\*(COFA(IA,I2)\*\*2)

123 CONTINUE

112 CONTINUE

GO TO 140

250 CONTINUE

IF(IA.NE.JA)GO TO 177

```

ANA=NA
AM(I)=AM(I)+ANA*ANT*BAR
GO TO 140
177 DO 130 IN=2,NC
DO 130 IC=2,NB
LA=IAF(IC)
LB=IE(IC)
FACTU=PI*(EPSI(LA)-EPSI(LB))
DO 130 I9=1,NATOM
JAI=IATOM(I9)
AM(I)=AM(I)-COE2(LA,LB,I9)*X(I,JAI)*COFA(IN,IC)*FACTU
130 CONTINUE
140 CONTINUE
125 CONTINUE
AMX(IA,JA)=AM(1)
AMY(IA,JA)=AM(2)
AMZ(IA,JA)=AM(3)
110 CONTINUE
100 CONTINUE
DO 150 IA=1,NV
DO 150 JA=1,NC
AMX(JA,IA)=AMX(IA,JA)
AMY(JA,IA)=AMY(IA,JA)
AMZ(JA,IA)=AMZ(IA,JA)
150 CONTINUE
6 CALCULO DE MOMENTOS MAGNETICOS COMPLETOS,BMYZ=Y DZ NOTACION SIMILAR
DO 160 IA1=1,NV
DO 160 IA2=1,NC
BMYZ(IA1,IA2)=0.
BMZY(IA1,IA2)=0.
BMZX(IA1,IA2)=0.
BMXZ(IA1,IA2)=0.
BMXY(IA1,IA2)=0.
BMYX(IA1,IA2)=0.
DO 160 IA3=1,NC
BMYZ(IA1,IA2)=BMYZ(IA1,IA2)+EMY(IA1,IA3)*AMZ(IA3,IA2)
BMZY(IA1,IA2)=BMZY(IA1,IA2)+EMZ(IA1,IA3)*AMY(IA3,IA2)
BMZX(IA1,IA2)=BMZX(IA1,IA2)+EMZ(IA1,IA3)*AMX(IA3,IA2)
BMXZ(IA1,IA2)=BMXZ(IA1,IA2)+EMX(IA1,IA3)*AMZ(IA3,IA2)
BMXY(IA1,IA2)=BMXY(IA1,IA2)+EMX(IA1,IA3)*AMY(IA3,IA2)
BMYX(IA1,IA2)=BMYX(IA1,IA2)+EMY(IA1,IA3)*AMX(IA3,IA2)
160 CONTINUE

```

C EMPIEZAN LOS MOMENTOS MAGNETICOS MX,MY,MZ

```

DO 170 II=1,NV
DO 170 JJ=1,NC
BLYZX(II, JJ)=(BMYZ(II, JJ)-BMZY(II, JJ))*ANV
BLZXY(II, JJ)=(BMZX(II, JJ)-BMXZ(II, JJ))*ANV
170 BLXYZ(II, JJ)=(BMXY(II, JJ)-BMYX(II, JJ))*ANV
DO 190 I=1, NV
DO 190 J=1, NC
SEMXX(I, J)=EMX(I, J)
SEMYY(I, J)=EMY(I, J)
SEMZZ(I, J)=EMZ(I, J)
SAMXX(I, J)=BLYZX(I, J)
SAMYI(I, J)=BLZXY(I, J)
SAMZZ(I, J)=BLXYZ(I, J)

```

190 CONTINUE

C CALCULO MOMENTOS ELECTRICOS Y MAGNETICO TENSORIAL

```

DO 800 K=1, NAND
AFRA2=AFRA(K)*AFRA(K)
DO 180 I=1, NV
AEMXX(I, K)=0.
AEMXY(I, K)=0.
AEMXZ(I, K)=0.
AEMYY(I, K)=0.
AEMYZ(I, K)=0.
AEMZZ(I, K)=0.
CMXX(I, K)=0.
CMXY(I, K)=0.
CMXZ(I, K)=0.
CMYY(I, K)=0.
CMYZ(I, K)=0.
CMZZ(I, K)=0.
CTE(I, K)=0.
CTM(I, K)=0.
DO 180 J=1, NC
IF(I.EQ.J)GO TO 180
ENIJ=ENE(I)-ENE(J)
ENJI=-ENIJ
EIJ2=ENIJ*ENIJ
PUCHA=2.*ENJI/(EIJ2-AFRA2)
POCA=BAL*PUCHA/2.
AEMXX(I, K)=AEMXX(I, K)+EMX(I, J)*EMX(J, I)*PUCHA
AEMXY(I, K)=AEMXY(I, K)+EMX(I, J)*EMY(J, I)*PUCHA
AEMXZ(I, K)=AEMXZ(I, K)+EMX(I, J)*EMZ(J, I)*PUCHA
AEMYY(I, K)=AEMYY(I, K)+EMY(I, J)*EMY(J, I)*PUCHA

```

```

AEMYZ(I,K)=AEMYZ(I,K)+EMY(I,J)*EMZ(J,I)*PUCHA
AEMZZ(I,K)=AEMZZ(I,K)+EMZ(I,J)*EMZ(J,I)*PUCHA
CMXX(I,K)=CMXX(I,K)+BLYZX(I,J)*BLYZX(J,I)*PUCHA
CMXY(I,K)=CMXY(I,K)+BLYZX(I,J)*BLZXY(J,I)*PUCHA
CMXZ(I,K)=CMXZ(I,K)+BLYZX(I,J)*BLXYZ(J,I)*PUCHA
CMYY(I,K)=CMYY(I,K)+BLZXY(I,J)*BLZXY(J,I)*PUCHA
CMYZ(I,K)=CMYZ(I,K)+BLZXY(I,J)*BLXYZ(J,I)*PUCHA
CMZZ(I,K)=CMZZ(I,K)+BLXYZ(I,J)*BLXYZ(J,I)*PUCHA

```

C TERMINO TENSORES ELECTRICO Y MAGNETICO, EMPIEZAN Y K EYRING

```

CTE(I,K)=CTE(I,K)+(SEMXX(I,J)**2+SEMY(I,J)**2+SEMZZ(I,J)**2)*POCA
CTM(I,K)=CTM(I,K)+(SAMXX(I,J)**2+SAMY(I,J)**2+SAMZZ(I,J)**2)*POCA

```

180 CONTINUE

C TERMINO CALCULO ALFA Y K, EMPIEZAN BETA=CAM Y GAMMA=COM, EYRING

```

DO 300 I=1,NV
COMXX(I,K)=0.
COMXY(I,K)=0.
COMXZ(I,K)=0.
COMYY(I,K)=0.
COMYZ(I,K)=0.
COMZZ(I,K)=0.
CAMXX(I,K)=0.
CAMXY(I,K)=0.
CAMXZ(I,K)=0.
CAMYY(I,K)=0.
CAMYZ(I,K)=0.
CAMZZ(I,K)=0.
DO 305 J=1,NC
IF(I.EQ,J)GO TO 300
ENIJ=ENE(I)-ENE(J)
ENJI=-ENIJ
EIJ2=ENIJ*ENIJ
PUCHA=2.*ENJI/(EIJ2-AFRA2)
PACHO=EP*PUCHA/2.
COMXX(I,K)=COMXX(I,K)+EMX(I,J)*BLYZX(J,I)*PUCHA
COMXY(I,K)=COMXY(I,K)+EMX(I,J)*BLZXY(J,I)*PUCHA
COMXZ(I,K)=COMXZ(I,K)+EMX(I,J)*BLXYZ(J,I)*PUCHA
COMYY(I,K)=COMYY(I,K)+EMY(I,J)*BLZXY(J,I)*PUCHA
COMYZ(I,K)=COMYZ(I,K)+EMY(I,J)*BLXYZ(J,I)*PUCHA
COMZZ(I,K)=COMZZ(I,K)+EMZ(I,J)*BLXYZ(J,I)*PUCHA
CAMXX(I,K)=CAMXX(I,K)+EMX(I,J)*BLYZX(J,I)*PACHO
CAMXY(I,K)=CAMXY(I,K)+EMX(I,J)*BLZXY(J,I)*PACHO
CAMXZ(I,K)=CAMXZ(I,K)+EMX(I,J)*BLXYZ(J,I)*PACHO
CAMYY(I,K)=CAMYY(I,K)+EMY(I,J)*BLZXY(J,I)*PACHO

```



```

      CAMYZ(I,K)=CAMYZ(I,K)+EMY(I,J)*B1XYZ(J,I)*PACHO
305 CAMZZ(I,K)=CAMZZ(I,K)+EMZ(I,J)*B1XYZ(J,I)*PACHO
300 CONTINUE
      DO 310 I=1,NV
          COT(I,K)=(COMXX(I,K)+COMYY(I,K)+COMZZ(I,K))*CU
310 CAT(I,K)=(CAMXX(I,K)+CAMYY(I,K)+CAMZZ(I,K))*CU
          DO 311 I=1,NV
              SX(I)=0.
              SY(I)=0.
              SZ(I)=0.
          DO 311 J=1,NC
              IF(I.NE.J)GO TO 311
              SX(I)=SX(I)+SEMXX(I,J)
              SY(I)=SY(I)+SEMYY(I,J)
              SZ(I)=SZ(I)+SEMYZ(I,J)
311 CONTINUE
          DO 314 I=1,NV
              ET(I)=SX(I)**2+SY(I)**2+SZ(I)**2
314 ET(I)=SQRT(ET(I))
800 CONTINUE
      PRINT 700 TITU
      DO 400 I=1,NV
          DO 400 K=1,NAND
              PRINT 821,K,AFRA(K)
821 FORMAT(SX,'K=',I2,SX,'FREC=',E12.5,/)
          PRINT 410
410 FORMAT(SX;MOMENTO DIPOLAR PERMANENTE',/)
          PRINT 411,I,SX(I),I,SY(I),I,SZ(I)
411 FORMAT(SX,'EMX(',I2,')=',E12.5,SX,'EMY(',I2,')=',E12.5,SX,'EMZ(',
1I2,')=',E12.5,/)
          PRINT 412
412 FORMAT($X,'MOMENTO DIPOLAR MODULO',/)
          PRINT 414,I,ET(I)
414 FORMAT(SX,'MOME(',I2,')=',E12.5,/)
          PRINT 500
500 FORMAT(SX,'SENSOR DE POLARIZABILIDAD',/)
          PRINT 401,I,K,AEMXX(I,K),I,K,AEMXY(I,K),I,K,AEMXZ(I,K)
401 FORMAT(SX,'EMXX(',I1,I1,')=',E12.5,SX,'EMXY(',I1,I1,')=',E12.5,SX
1,'EMXZ(',I1,I1,')=',E12.5,/)
          PRINT 402,I,K,AEMYY(I,K),I,K,AEMYZ(I,K),I,K,AEMZZ(I,K)
402 FORMAT(SX,'EMYY(',I1,I1,')=',E12.5,SX,'EMYZ(',I1,I1,')=',E12.5,SX
1,'EMZZ(',I1,I1,')=',E12.5,/)
          PRINT 501

```

```

501 FORMAT(5X, 'TENSOR DE POLARIZABILIDAD MAGNETICA',/)
      PRINT 403, I, K, CMXX(I, K), I, K, CMXY(I, K), I, K, CMXZ(I, K)
403 FORMAT(5X, 'SMXX(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X, 'SMXY(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X
1, 'SMXZ(', I1, I1, ')=' , E12.5, /)
      PRINT 404, I, K, CMYY(I, K), I, K, CMYZ(I, K), I, K, CMZZ(I, K)
404 FORMAT(5X, 'SMYY(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X, 'SMYZ(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X
1, 'SMZZ(', I1, I1, ')=' , E12.5, /)
      PRINT 502
502 FORMAT(5X, 'POLAR Y SUSCEP LUZ POLARIZADA',/)
      PRINT 405, I, K, CTE(I, K), I, K, CTM(I, K)
405 FORMAT(5X, 'CTEC(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X, 'CTMC(', I1, I1, ')=' , E12.5, /)
      PRINT 503
503 FORMAT(5X, 'TENSOR GAMMA',/)
      PRINT 406, I, K, COMXX(I, K), I, K, COMXY(I, K), I, K, COMXZ(I, K)
406 FORMAT(5X, 'COXX(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X, 'COXY(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X
1, 'COXZ(', I1, I1, ')=' , E12.5, /)
      PRINT 407, I, K, COMYY(I, K), I, K, COMYZ(I, K), I, K, COMZZ(I, K)
407 FORMAT(5X, 'COYY(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X, 'COYZ(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X
1, 'COZZ(', I1, I1, ')=' , E12.5, /)
      PRINT 504
504 FORMAT(5X, 'TENSOR BETA',/)
      PRINT 408, I, K, CAMXX(I, K), I, K, CAMXY(I, K), I, K, CAMXZ(I, K)
408 FORMAT(5X, 'CAXX(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X, 'CAXY(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X
1, 'CAXZ(', I1, I1, ')=' , E12.5, /)
      PRINT 409, I, K, CAMYY(I, K), I, K, CAMYZ(I, K), I, K, CAMZZ(I, K)
409 FORMAT(5X, 'CAYY(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X, 'CAYZ(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X
1, 'CAZZ(', I1, I1, ')=' , E12.5, /)
      PRINT 420
420 FORMAT(5X, 'BETA Y GAMMA ESCALAR RESPECTIVA',/)
      PRINT 421, I, K, CAT(I, K), I, K, COT(I, K)
421 FORMAT(5X, 'BETA(', I1, I1, ')=' , E12.5, 5X, 'GAM(', I1, I1, ')=' , E12.5, /)
400 CONTINUE
      IF(W)510, 510, 514
510 CONTINUE
      CALL EXIT
      STOP
      END

```

**b) Método CNDO/M-SCF-CI**

Este método, que fue utilizado para los cálculos previos a la determinación de los tensores, presenta una serie de opciones en lo que respecta al cálculo de las integrales, estados a estudiar, etc.

A continuación detallaremos las opciones utilizadas:

- 1° Número de interacciones permitido: Opción de omisión.
- 2° Número de configuraciones incluidas: 40
- 3° Tipo de integrales de repulsión electrónica: Pariser.
- 4° Interacción de configuraciones: Singuletes y tripletes.
- 5° Tipo de integrales de repulsión nuclear: Gammas.
- 6° Tipo de Betas: de acuerdo a Delbene-Jaffe (CNDO/S).
- 7° Tipos de estados y cálculos: Estado fundamental, singulete (CI)
- 8° Acoplamiento spin-órbita: Entre el primer triplete y todos los singuletes y entre el fundamental y todos los tripletes.