

```

PROGRAM WFPPP
*****
CHARACTER*11 VERSION/' 2009.02.05'/
*****
C
C Programm fuer HMO(Hueckel)- und PPP(Pariser-Parr-Pople,Pi-SCF)
C
C HMO und Pi-SCF-CI-Berechnungen fuer Singulett-Zustaende.
C Entwickelt aus dem PPP-CSVCH-Programm
C von E.Pfeil, A.Mehlhorn und J.Fabian, TU Dresden.
C Referenzzitat: Programm WFPPP PPP-Pi-SCF-Singulett-CI
C Juergen Fabian, Technische Universitaet Dresden und'',
C Hans-Ulrich Wagner, Ludwig-Maximilians-Universitaet Muenchen.
C
C -----
C Das Programm WFPPP berechnet Pi-Systeme mit folgenden drei Pi-Typen
C Pityp=1  p-Orbital in sp2-Hybrid mit 1 Pi-Elektron,   z.B. sp2-C-Atom
C Pityp=2  p-Orbital in sp2-Hybrid mit 2 Pi-Elektronen, z.B. Pyrrol-N
C Pityp=3  p-Orbital in sp-Hybrid mit 1 Pi-Elektron,   z.B. Nitril-C
C
C Enthaelt die erste Zeile der Eingabe-Datei das Wort PARAMETER,
C dann gibt das Programm C alle eingebauten Atomtypen und PPP-Parameter
C in Tabellenform aus und dann stoppt es.
C -----
C Eingabe xyz-Datei im BABEL-Standardformat
C 1.Zeile Anzahl der Atome = n
C 2.Zeile Titelzeile (wird in WFPPP zur Parametersteuerung verwendet)
C 3.Zeile bis n+2.Zeile Element-Symbol x-, y-, z-Koordinaten
C
C Schluesselwoerter, die in der ersten Zeile erkannt und verwertet
C werden. Wenn die Schluesselwoerter nicht eingegeben werden, dann wird
C die hier angegebene Voreinstellung verwendet. Die Reihenfolge der
C Schluesselwoerter ist beliebig, das ==-Zeichen muss direkt am Wort und
C an der Zahl C stehen ohne Luecke. Kleinschreibung wird in Gross
C umgewandelt.
C
C SYBYL=1  Eingabe im Sybyl-Format (siehe Beipiel unten)
C
C CHARGE=0 Ladung, Kationen CHARGE=1, Anionen CHARGE=-1 etc.
C LADUNG=0 Auch das deutsche Wort wird erkannt.
C
C Steuerung der Verfahren ueber Schluesselwort PA in der Titelzeile
C Fuenf Verfahren (PA=1 bis 5) sind moeglich
C PA=1    HMO    Hueckel-LCAO-MO
C PA=2    OMEGA Hueckel-LCAO-MO MIT SC(ALPHA,BETA)
C PA=3    PPP Pi-SCF (E-Repulsion nach Mataga)
C PA=4 = Voreinstellung: PPP Pi-SCF (E-Repulsion nach Mataga),
C        mit moeglichen Alpha-Beta-Gamma-Variationen, gesteuert durch
C        die Parameter ALPHA,BETA,HET,BET,GAMMA,NIL siehe unten
C PA=5    Berechnung der Beta-Werte aus der Geometrie
C        Beta = -2.318 exp(-2.3(R - Ro), Beta in eV R in A, nur fuer CC!
C
C        mit folgenden Parametern (Voreinstellungen=Werte) :
C ALPHA=0.0 Alpha-Variation fuer Atomzentren
C BETA=2.3  Beta-Variation fuer Bindungen
C HET=0    Alpha-Beta-Variation auch fuer Heteroatome    0=Nein 1=Ja
C BET=x    Maximale Atomnummer Alpha-Beta-Variation (sonst x=natom)
C GAMMA=1.0 Gamma-Parameter fuer die Mataga-Formel
C NIL=L    Nishimoto L in NIK=0.33*L+0.48 L=Anzahl DB im Chromophor
C Sowohl NIL als auch NIK sind REAL-Werte keine Ganzzahlen

```

```

C
C      U=u  Vorgabe unbesetzte MO''S in der CI (u wird sonst berechnet)
C      V=v  Vorgabe unbesetzte MO''S in der CI (v wird sonst berechnet)
C      UE=n Zu druckende Uebergaenge >190 nm  (n wird sonst berechnet)
C      IS=4 Zu druckende Ladungsverteil. im angeregten Singulettzustand
C      IT=99 SCF-Iterationen maximal
C      BA=0 z.Zt.nicht (Ausgabe fuer BABA-Konfigurations-Analyse)
C      KU=0 z.Zt.nicht (KURODA-Analyse)
C      MA=0 MIM-Analyse, am Schluss Eingabe der Lokalisierung
C      AMA=0 z.Zt.nicht (Aufteilungsmatrix)
C      KDR=0 STOP nach Hueckel-Matrix-Ausdruck
C
C      A=0  Druck Zwischenergebnisse und Rechenkontrollen 0=Nein 1=Ja
C      D=0  Druck Elektronenwechselwirkungsintegrale Gamma
C      E=0  Druck Reaktivitaets-Indices
C      F=0  Druck Dipolmomente
C      G=0  Druck Hartree-Fock-, Dichte- und FCS-Matrix
C      H=0  Druck Konfigurations-WW-Matrix und Ladungsverteilungen
C
C
C
C Beispiele fuer Eingabe-Dateien.
C Zeilen mit * in der ersten C Spalte sind Datenzeilen.
C Alle Eingaben in jeder Zeile in freiem Format,
C natuerlich ohne * in der ersten Spalte.
C
C Es gibt verschiedene Varianten der Eingabe-Dateien:
C
C 1) Koordinaten-Eingabe der Molekuele ohne PPP-Parameter.
C Zwei Beispiele fuer eine Standard-Eingabe. Das Programm
C berechnet aus der Atomverknuepfung das vorliegende Pi-System,
C z.B. ein C-Atom mit drei Nachbar-Atomen ist sp2-hybridisiert und hat
C deswegen ein pi-Orbital. Fuer diese Variante muessen deswegen alle
C H-Atome auch mit eingegeben werden, sonst kann der Atomtyp nicht
C erkannt werden. Aliphatische Gruppen koennen in der Eingabe bleiben,
C sie werden automatisch aus dem Pi-System eliminiert.
C
C-----
C-----1.Zeile:          Textzeile mit Schluesselwoertern
C-----2.Zeile:          Anzahl der Atome (inklusive H-Atome)
C-----3. bis 13. Zeile: Element-Symbol und Atomkoordinaten,
C  Elem      X(I)          Y(I)          Z(I)          jedes Atom eine Zeile
C-----
* 10
* Beispiel 1 Butadien Standard-Eingabe mit allen Atomen
* C   1.2124   0.7000   .0000
* C   0.0000   0.0000   .0000
* C  -1.2124   0.7000   .0000
* C  -2.4248   0.0000   .0000
* H  -3.4800   0.5400   .0000
* H  -2.4248  -1.1000   .0000
* H  -1.2124   2.8000   .0000
* H   0.0000  -1.1000   .0000
* H   1.2124   2.8000   .0000
* H   2.1600   0.1600   .0000
C-----
C-----Ende der Standard-Eingabeohne Leerzeilen am Schluss

```

```

C-----
* 11
* Beispiel 2 Fulvenon 2-Amino-3-aza-cyclopentadien-1-on
* O -0.459 -2.193 0.0
* C -0.459 -0.959 0.0
* C 0.724 -0.055 0.0
* C -1.617 -0.034 0.0
* N 0.256 1.254 0.0
* C -1.156 1.264 0.0
* N 2.052 -0.370 0.0
* H -1.826 2.185 0.0
* H -2.728 -0.290 0.0
* H 2.554 -1.360 0.0
* H 2.659 0.559 0.0

```

```

C-----
C Das Programm erkennt auch Kernladungszahlen statt Elementsymbolen:

```

```

C-----
* 24
* Beispiel 3 Trimethin-cyanin Me2N-CH=CH-CH-N(+)Me2 CHARGE=1 PA=3
* 6 -0.00101 -0.18255 0.05301
* 1 -0.00060 -0.07739 1.14938
* 6 1.21115 -0.25609 -0.64774
* 1 1.18338 -0.36231 -1.75784
* 6 -1.21366 -0.24338 -0.64804
* 7 -2.43187 -0.18433 -0.09833
* 7 2.42976 -0.20981 -0.09775
* 6 -2.61825 -0.04654 1.32940
* 1 -3.71472 -0.01830 1.56857
* 1 -2.14905 -0.91756 1.86244
* 1 -2.14019 0.90531 1.68769
* 6 3.62460 -0.29394 -0.91095
* 1 3.36685 -0.39645 -1.99789
* 1 4.23747 0.63702 -0.76454
* 1 4.22772 -1.18674 -0.59018
* 6 2.61723 -0.07404 1.33004
* 1 2.14924 0.88285 1.68821
* 1 2.13866 -0.94002 1.86295
* 1 3.71388 -0.05747 1.56949
* 6 -3.62734 -0.25599 -0.91182
* 1 -4.23977 -1.14250 -0.59125
* 1 -4.23053 0.68128 -0.76551
* 1 -3.37041 -0.36114 -1.99870
* 1 -1.18674 -0.34989 -1.75812

```

```

C-----
C
C 2) Koordinaten-Eingabe der Molekuele mit PPP-Parametern. Dieses
C Beispiel zeigt eine Eingabe fuer ein verdrilltes Acrolein. Da fuer
C alle (nicht-H-)-Atome fuer die Zentren PPP-Parameter angegeben werden,
C braucht das WFPPP-Programm hier keine H-Atome zur Bestimmung der
C Atomverknuepfung. Die Bindungs-PPP-Parameter werden aus den
C angegebenen pi-Typen als Standard-Werte im Programm bestimmt.
C Diese koennen dann aber durch zusaetzliche Zeilen nach den Koordinaten
C ueberschrieben werden, im Beispiel nur fuer die verdrillte Bindung 2-3
C Wenn solche Bindungs-PPP-Parameter angegeben werden, muss zwischen
C xyz und diesen eine Leerzeile sein, also:
C-----
C-----1. Zeile:          Anzahl der Atome (ohne H-Atome)
C-----2. Zeile:          Titelzeile mit Schluesselwoertern
C-----3. bis 6. Zeile: Elementsymbol, Koordinaten
C  Elem   X(I)           Y(I)           Z(I)   Pi-Typ  IP(I)  EA(I)
C-----7. Zeile:          Leerzeile, muss vorhanden sein,
C                           wenn Beta-Spezialparameterzeilen folgen
C-----8. Zeile(n) PPP-Bindungsparameter, optional nur fuer Bindungen
C           fuer die die Standard-Parameter geaendert werden sollen, fuer
C           jede Bindung eine Zeile. I und J sind die Nummern der Atome,
C           zwischen denen die Bindung variiert werden soll.
C   I  J  Abstand(I-J)  SCF-Beta(I-J) [eV]  Gamma(I-J) [eV]
C-----
* 4
* Beispiel 4  Acrolein 45 Grad verdrillt ohne Betavariation BETA=0.0
* C -1.13213879 -0.47312002 0.00000000    1  11.42000  0.58000
* C  0.20023125 -0.46709003 0.00000000    1  11.42000  0.58000
* C  0.98246132  0.77772997 0.00000000    1  11.42000  0.58000
* O  1.95849430  0.95715165 0.73095038    1  17.28000  2.70000
*
*   2  3   1.40000           1.15900           10.84000
*
C-----
C-----Ende der Spezial-Eingabe mit 1 Leerzeile am Schluss !!!

```

```

C-----
C Beispiele für Eingabe-Dateien erstellt mit dem SYBYL-Programm
C-----
* Beispiel 5      1.Zeile=Titelzeile      Acrolein SYBYL=1 PA=4
* 8 mol |      |
* 1  2  1.2124  0.7000  .00000
* 2  2  0.0000  0.0000  .0000C
* 3  2 -1.2124  0.7000  .0000C
* 4  2 -2.4248  0.0000  .0000C
* 5 13 -3.4800  0.5400  .0000H
* 6 13 -2.4248 -1.1000  .0000H
* 7 13 -1.2124  2.8000  .0000H
* 8 13  0.0000 -1.1000  .0000H
*
C-----
* Beispiel 6      SYBYL=1 PENTAMETHIN ohne H-Atome PA=3 CHARGE=1
* 7 MOL
* 1  6  3.6628 -0.0513  0.0000N 2
* 2  2  2.4204 -0.5229 -0.0000C 1
* 3  2  1.2431  0.2270  0.0000C 1
* 4  2  0.0000 -0.4103 -0.0000C 1
* 5  2 -1.2431  0.2270  0.0000C 1
* 6  2 -2.4204 -0.5229 -0.0000C 1
* 7  6 -3.6628 -0.0513 -0.0000N 2
* 6 MOL
* 1  1  2          2
* 2  2  3          1
* 3  3  4          2
* 4  4  5          1
* 5  5  6          1
* 6  6  7          2
*
C-----

```