**Ventana de selección de orbitales**

En esta ventana se escogen los orbitales, para los cuales debe construirse un “cubo” (una rejilla tridimensional de valores de densidad de energía). Si la caja de selección “Save to cube file” se encuentra marcada, estos cubos son guardados en un fichero después de su construcción. La caja de texto "Map points per angstrom" determina la densidad de la rejilla (el número total de puntos es proporcional a este valor a la tercera potencia). La caja de texto "Map size expansion" determina cuan largo debe ser extendido el cubo sobre la molécula (quiere decir, el tamaño del cubo). El número total de puntos es mostrado en la esquina inferior izquierda; el tiempo de construcción de cada orbital es proporcional a este valor. El botón "Explicit coordinates" permite especificar el número exacto de puntos de la rejilla y sus coordenadas.

Si se escoge el elemento de menú "Total SCF density", el programa calculará la densidad de energía total (la suma de los cuadrados de todos los orbitales moleculares alfa y beta). Si se escoge "Alpha - Beta SCF density", el programa calculará la densidad de espín (suma de los cuadrados de todos los orbitales alfa ocupados menos la suma de los cuadrados de todos los orbitales beta ocupados). Si se escoge el elemento de menú "Alpha - Beta density of selected MOs", el programa calculará la suma de los cuadrados de todos los orbitales alfa seleccionados menos la suma de los cuadrados de todos los orbitales beta seleccionados.