

mpshift

csonei

csplop

ssints

tsints

vsints

lints

pploop

dmints

pmints

csloop

Falls DFT:

dftpart

csrhf

csurf

cpscf

makeu

makecs

dsmat

p3loop

Falls HF oder
Hybrid-DFT:

shloop

maked1

maked2

dvdson

maked3

Falls HF oder Hybrid-DFT:
Lösen der CPHF Gleichungen
durch Iterieren bis zur Konvergenz.
Sonst erfolgt direkte Berechnung
ohne Iteration

Ausgabe der diamagnetischen, paramagnetisch ungestörten,
paramagnetisch gestörten und gesamten Abschirmungstensoren