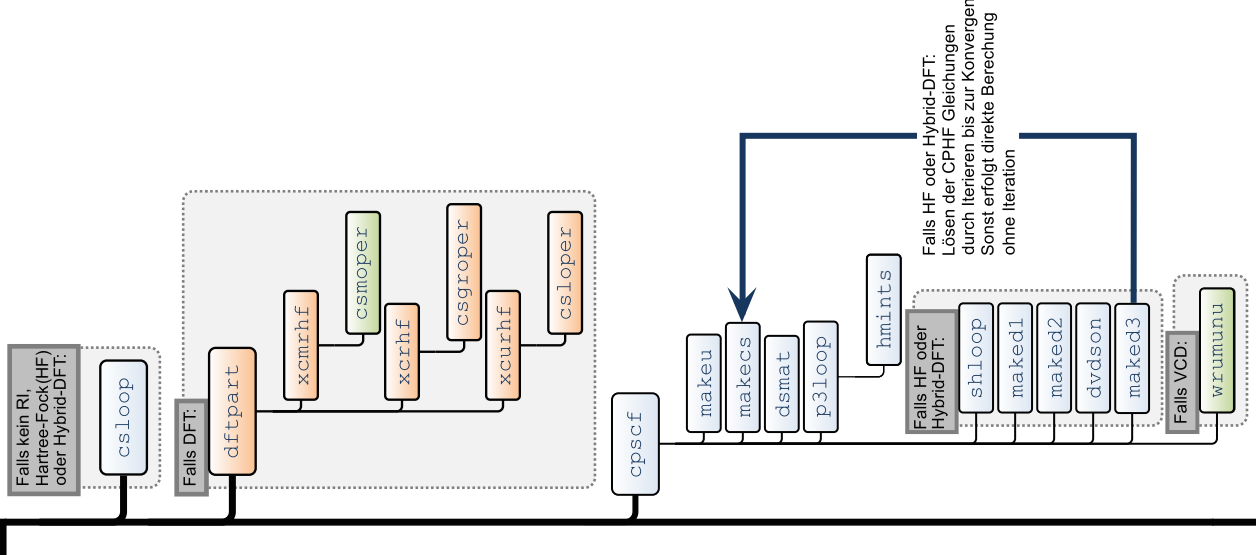
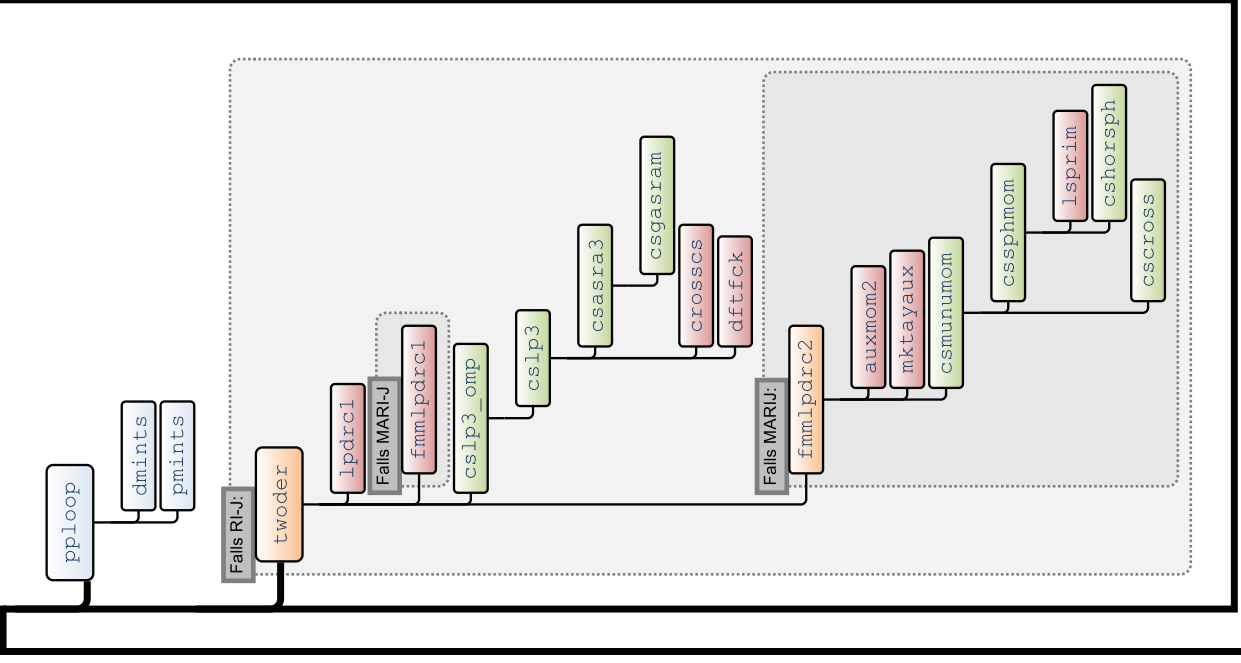
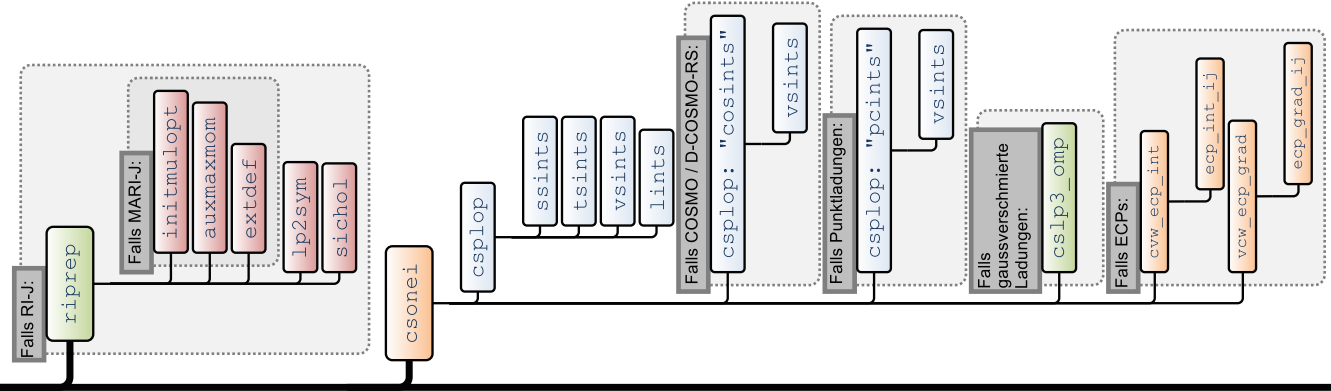


mpshift



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

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