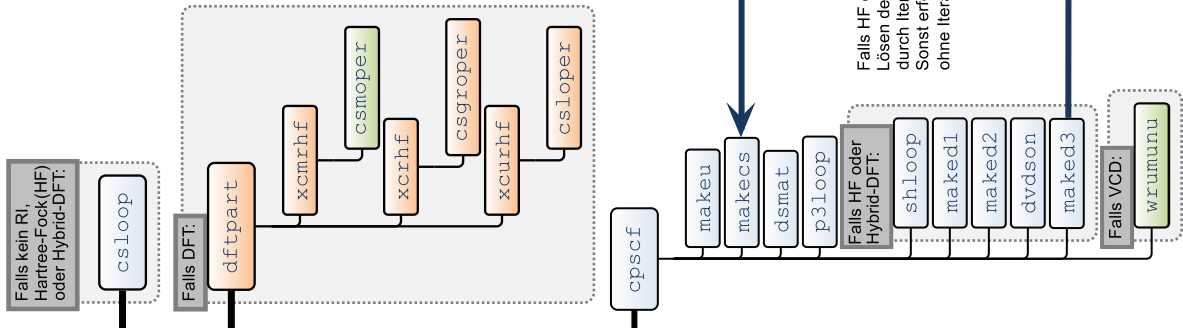
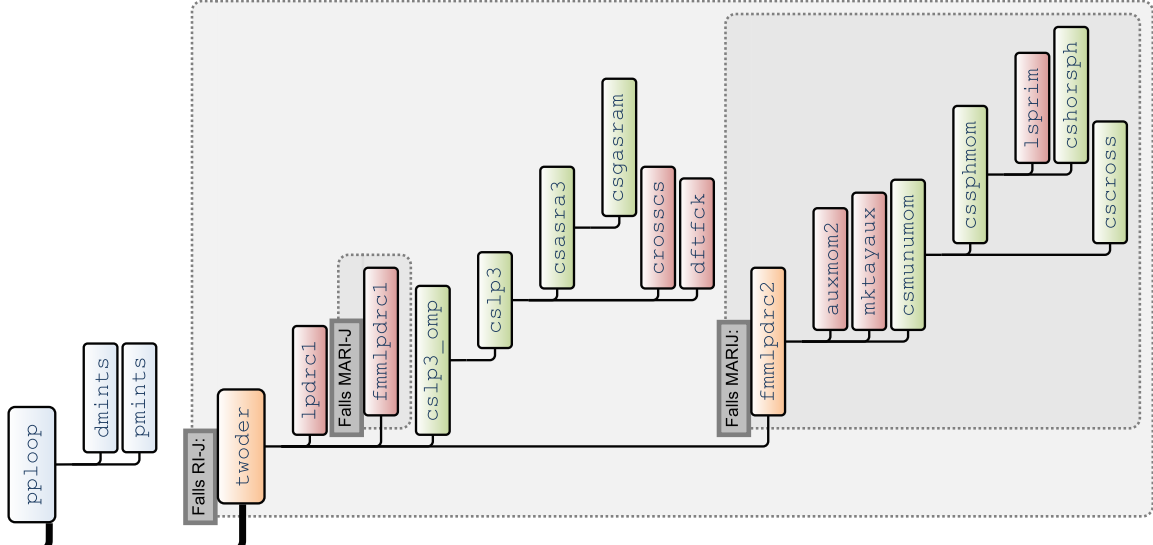
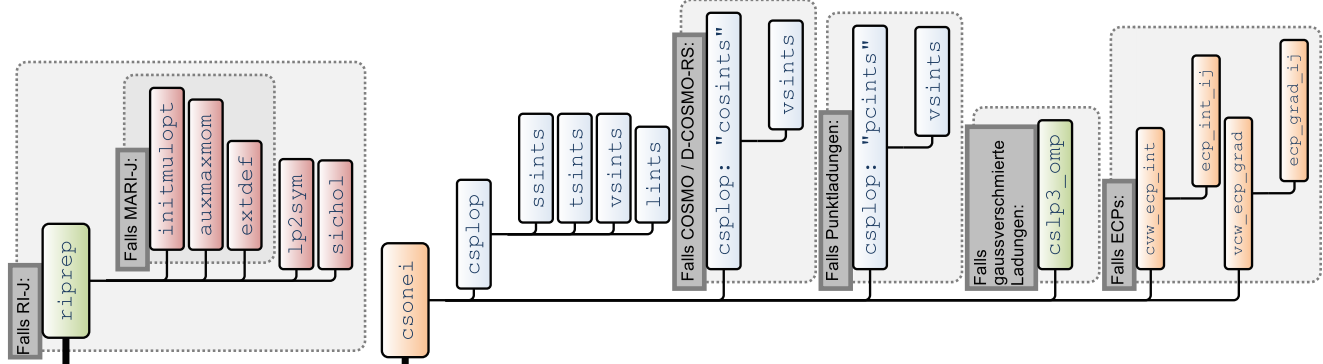


mpshift



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