Hartree-fock-

Dft-

ECP-

Zum ersten Mal

Integrale vierzentren-zweielektronen-integrale

Zum einen

Zum anderen

Paketes

Im Weiteren

Abschirmungskonstanten

Ri marij

Beitrages

Zustandes

Programmcodes

Ihr

Abstand abstände

Einteilchen-Wellenfunktion mehrteilchen

Einelektronen-Hamiltonoperator

Nicht wechselwirkende

-relativistisch

Gemischte

Hybrid

Levi-civita

Quantenzahl

Nahfeld

Gaußförmig

Funktional und basisatzquellen

Um 1 eins

All-Elektronen

Nichtrelativisitschen

Vcd- ir-

Intel xeon

6-31g\*

Terrbutyl

Sodass

NMR-

Delokalisierung

Eichursprungsinvarianz

Man  
weggelassen

Mithilfe

Zurückzuführen

A.5. und A.4. Tauschen?

Coppy3 unterschrift

SCF-

-Nanoröhren

Cnt konstruktion

Derselbe dieselbe dasselbe

Weist

COSMOs

tBu

MA Robert

-Beiträge

Kartesische

Eichursprungs-invarianten

[x]

Formelende

Kein komma vor mit

Imaginäre einheit

BP86- …

Def2-TZVP-Basis

COSMO-

DCOSMO-

md-

-chemische Verschiebung

All-Elektronen-

-Basis

Kapitel -> abschnitt

Mpshift-

Aoforce-

Integrale d3

File Datei

Alpha-d-glucose-Einheiten

Letztere letztere (Bezugswort? Dann klein) erstere

Polyhex- armchair- zigzag-

90er-Jahre

-nhc

Vorzeichen

DFT-Funktionale weg

Titel Robert MA

Dielektrizitätskonstante -> relative Permittivität

Standard -> gewöhnliches

Response -> Antwort?

Citenum

B3-LYP -> B3LYP