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

X2c quelle

Um 1 eins

All-Elektronen

Nichtrelativisitschen

Vcd- ir-

Intel xeon

6-31g\*

terrbutyl