

Метод обчислення властивостей молекул

1 Методи квантової хімії

- Методи Хартрі-Фока
 - Hartree–Fock (HF)
 - Restricted open-shell Hartree–Fock (ROHF)
 - Unrestricted Hartree–Fock (UHF)
- Методи Пост-Хартрі-Фока
 - Configuration interaction (CI)
 - Coupled cluster (CC)
 - Møller–Plesset perturbation theory (MPn)
- Multi-reference methods
 - Multi-configurational self-consistent field (MCSCF including CASSCF and RASSCF)
 - Multi-reference configuration interaction (MRCI)
 - Complete active space perturbation theory (CASPTn)
 - State universal multi-reference coupled-cluster theory (SUMR-CC)