

1. Record Nr.	UNINA9910156300303321
Titolo	. //
Pubbl/distr/stampa	, : , 2007.11 : , : , , 2007
ISBN	4-7853-7515-9
Edizione	[1st ed.]
Descrizione fisica	1
Classificazione	431.19
Altri autori (Persone)	
Soggetti	
Lingua di pubblicazione	Giapponese
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Note generali	(1978) "" : p455-457
Nota di contenuto	-- -- 15 -- 151 -- 152 -- 153 -- 154 -- 155 -- 156 -- 16 -- 161Born-Oppenheimer -- 1622 -- 163 -- 164 Hellmann-Feynman -- 165 -- 17 -- 171 -- 172 -- 173 -- 174 -- 175 -- 176 -- 177 -- 178 -- 179 -- 1710 -- 1711 -- 1712 -- 18Hartree-Fock -- 181Slater -- 182Hartree-Fock() -- 183KoopmansBrillouin -- 184Hartree-Fock() -- 185Roothaan-Hall -- 186 -- 187 -- 19ab initio -- 191ab initio -- 192 -- (a) -- (b)2 -- (c) -- (d) -- (e) -- 193(CI) -- 194Mller-Plesset -- 195(CC) -- 196 -- 197ab initio -- (a)1 -- (b) -- 20ab initio -- 201 -- 202 -- 203 -- 204 -- 205 -- (a) -- (b) -- (c) -- 206 --

(a) -- (b) -- (c) -- (d)
NMR -- 207 -- 208 -- (a)
-- (b)(PCM) -- (c)(IPCM) -- (d)
-- 21 -- 211Hohenberg-Kohn -- 212
Kohn-Sham -- 213 -- 214 -- 215
-- 216 -- (a) -- (b)
-- (c) -- (d) -- (e) -- (f)
-- (g) -- (h) -- 217MO
-- 22 -- 221 -- 222
Pariser-Parr-Pople -- 223CNDO -- 224INDONDDO --
225MINDO,MNDO,AM1,PM3SAM1 -- 226
-- (a) -- (b) -- (c) -- (d)
-- (e) -- (f).
(g) -- (h) -- 23 -- 231 -- (a) --
(b) -- (c) -- (d) -- (e) -- (f) -- (g)
van der Waals -- 232 -- (a) -- (b)
-- (c) -- (d) -- (e) -- 233
QM/MMONIOM -- 24 -- 241 -- 242 --
243 -- (a) -- (b)cis-
-- (c)SN2 -- (d) -- 244
-- (a) -- (b) -- (c)
-- (d) -- (e) -- A2(
II) -- A21 -- A22 -- A232
-- A24 -- A25Cn -- A26
-- A27 -- A28Lagrange --
A29 -- A210 -- A211 -- A211
-- (a) -- (b) -- -- -- .
