HyperChem – cząsteczka H_2

Metoda obliczeniowa: Ab initio – Medium (6-31G*), MP2

Długość wiązania H – H, A	Energia z MP2, kcal/mol	MP2, kcal/mol
0.1	1620.100170	-5.404141
0.2		
0.3		
0.4		
0.5		
0.6		
0.7		
0.8		
0.9		
1		
1.1		
1.2		
1.3		
1.4		
1.5		
Geometry optymalization	Single point energy	MP2 correlation energy
?	?	?