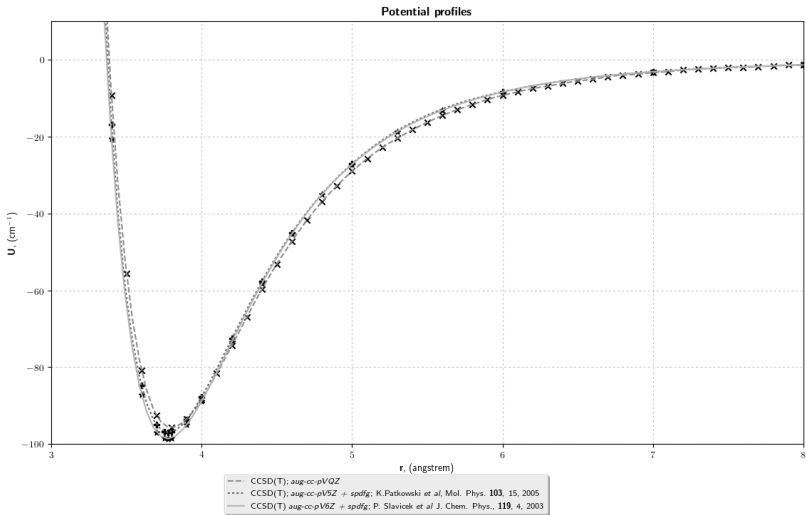
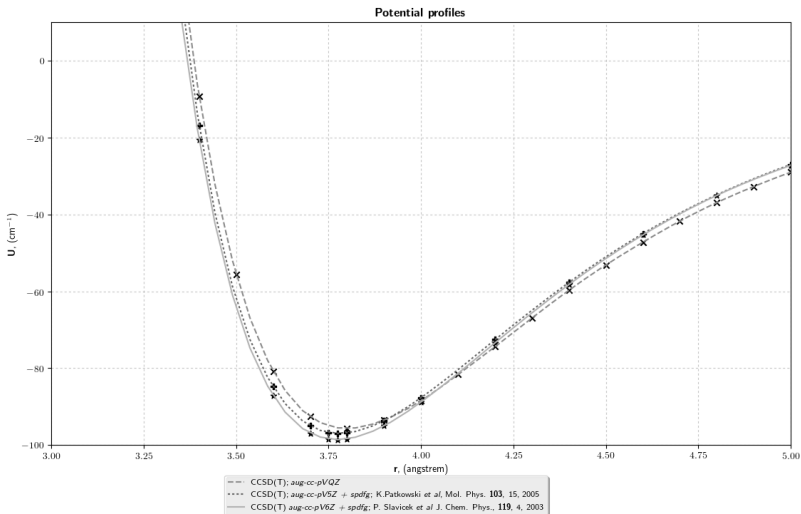


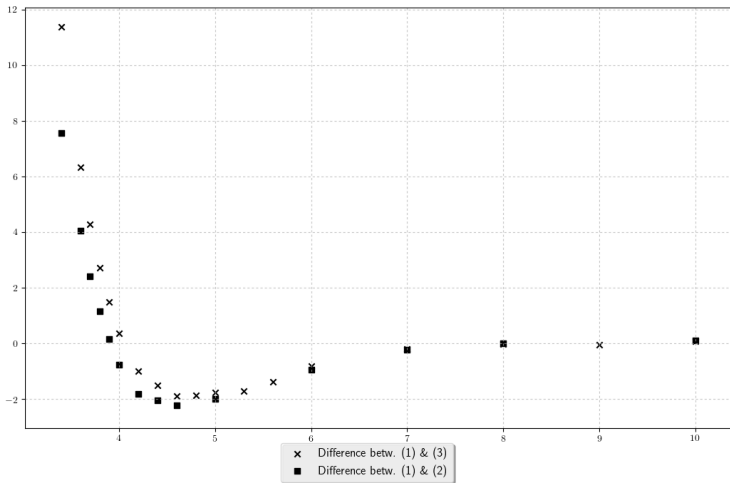
# Поверхности потенциальной энергии межмолекулярного взаимодействия I



# Поверхности потенциальной энергии межмолекулярного взаимодействия II



# Поверхности потенциальной энергии межмолекулярного взаимодействия III



$$EI_{AB} = E_{AB}^{opt} - E_A^{opt} - E_B^{opt} \implies EI_{AB} = E_{AB}^{opt} - E_A^{opt} - E_B^{opt} + \delta_{AB}^{BSSE}$$
$$\delta_{AB}^{BSSE} = (E_A + E_B) - (E_A^{AB} + E_B^{AB})$$

Суперпозиционная ошибка в минимуме потенциала

basis	$\delta_{AB}^{BSSE}$ , cm <sup>-1</sup>
<i>aug-cc-pvdz</i>	20.54
<i>aug-cc-pvtz</i>	15.08
<i>aug-cc-pvqz</i>	7.09

## Колебательные уровни основного состояния $Ar_2$

Transition	Exp. [1], $\text{cm}^{-1}$	Calc., $\text{cm}^{-1}$	Error bars, $\text{cm}^{-1}$ [1]
$v = 0 \rightarrow 1$	25.69	24.50	0.02
$v = 1 \rightarrow 2$	20.58	19.59	0.02
$v = 2 \rightarrow 3$	15.58	14.78	0.02
$v = 3 \rightarrow 4$	10.91	10.44	0.03
$v = 4 \rightarrow 5$	6.84	6.82	0.07

[1]: Herman *et al.* J. Chem. Phys. **89**, 4535 (1988)

# Вращательные уровни основного состояния $Ar_2$

Emp. potential [1]

J \ $\nu$	0	1	2
0	0.0	25.74	46.15
2	0.35	26.06	46.44
4	1.16	26.81	47.12
6	2.43	27.98	48.18
8	4.15	29.58	49.63
10	6.34	31.59	51.46
12	8.99	34.03	53.67

Calc. potential

J \ $\nu$	0	1	2
0	0.0	24.50	44.09
2	0.34	24.81	44.37
4	1.13	25.54	45.04
6	2.37	26.69	46.10
8	4.06	28.24	47.51
10	6.19	30.22	49.33
12	8.77	32.60	51.51

[1]: E. A. Colbourn *et al.*, J. Chem. Phys., 65, 1741 (1976)