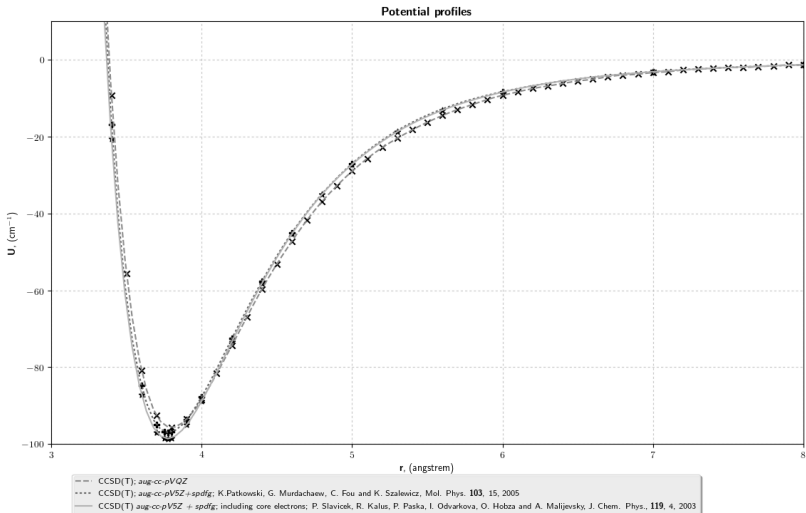


Поверхности потенциальной энергии межмолекулярного взаимодействия I



Поверхности потенциальной энергии межмолекулярного взаимодействия II

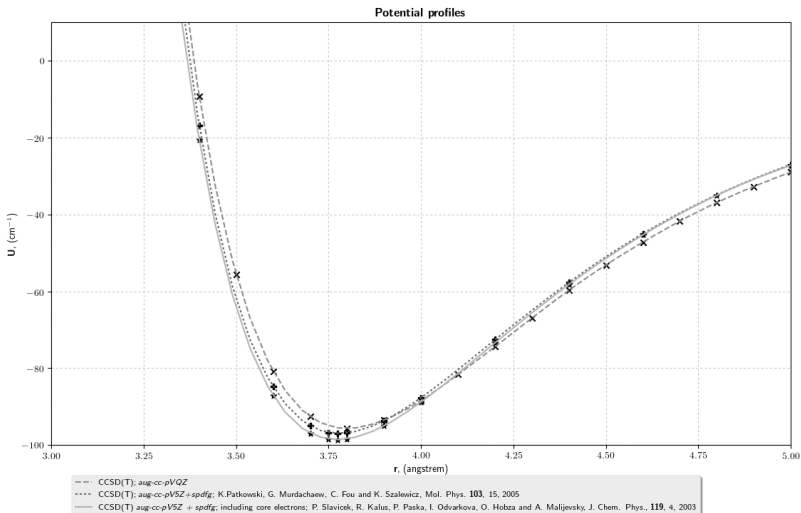


Таблица: Mol. & vib. params. H_2O

	Values		Freqs	
	Calc.	Exp.	Calc.	Exp.
r(O-H)	0.965	0.958	3931	3657 (asym.)
\angle HOH	105.754	104.478	3809	3756 (sym.)
μ (D)	2.195	1.855	1603	1595
	B3LYP; 6-31+G**	NIST	B3LYP; 6-31+G**	NIST