Моделирование потенциальной энергии взаимодействия двух атомов с помощью решения системы нелинейных уравнений

В.П. Кощеев1,\*), Ю.Н. Штанов2)

1)НИУ МАИ, филиал «Стрела», г. Жуковский, Моск. обл.

2)ТИУ, филиал ТИУ в г. Сургуте, г. Сургут

\*) e-mail: koshcheev1@yandex.ru

На рисунке представлены результаты сравнения расчетов [1] (кружки) и потенциальной энергии взаимодействия двух атомов азота (сплошная линия), которая вычислена в [2] с помощью численного решения системы нелинейных уравнений.



Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 20-07-00236 а.

Литература

1. Bhattacharya D., Shamasundar K. R., Emmanouilidou A.// J. Phys. Chem. A, 2021, V. 125, N. 36, 7778. DOI: 10.1021/acs.jpca.1c04613
2. Koshcheev V.P., Shtanov Yu.N. // arXiv:2112.07372. 2021. P.1.