Компьютерное Моделирование полной энергии молекулы азота

В.П. Кощеев1,\*), Ю.Н. Штанов2)

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

2)ФГБОУ ВО «ТИУ», филиал ТИУ в г. Сургуте, г. Сургут

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

На рисунке представлены результаты сравнения расчетов [1] (кружки) и полной энергии молекулы азота [2] для состояния N(4s)+N(4s) (сплошная линия) и состояния N(3p)+N(3p) (пунктирная линия).



Литература

1. Lie G. C., Clementi E. // J. Chem. Phys., 1974, V. 60, P. 1288. DOI: 10.1063/1.1681193
2. Koshcheev V.P., Shtanov Yu.N. // J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech., 2023, V. 17, N. 1, P. 266-270. DOI: 10.1134/S1027451023010317