

Расчет классических статсумм истинных димеров слабосвязанных пар с использованием многомерной поверхности потенциальной энергии

В нашей работе мы представляем формулы расчета точных классических статсумм истинных димеров слабосвязанных пар в парном приближении. В работе [1] представлен систематический подход к рассмотрению равновесию мономер-димер в рамках классической механики. Однако в в этой работе были использованы некоторые допущения, которые парадоксальным образом привели к абсолютно точным выражениям, что мы и демонстрируем в этой работе.

Квантово-механический подход к расчету статсумм требует знания колебательно-вращательной структуры уровней в парном потенциале, сложность и точность определения которой растет с увеличением количества степеней свободы.