



پوهنتون سرپل

مجله علمی-تحقیقی ارمان انبر

سال دوم، شماره دوم (مسلسل چهارم) ۱۴۴۷ هجری قمری

## بررسی سطح انرژی پوتنسیل بین‌المالیکولی سیستم $N_2-SO$

پوهنمل محمد هاشم عابدی<sup>۱</sup>، پوهنمل نورالله نیکبین<sup>۲</sup> و پوهاند عبدالقیوم رجبی<sup>۳</sup>

### چکیده

سطح انرژی پوتنسیل بین‌المالیکولی نقش اساسی در توصیف اثرات متقابل ضعیف بین مالیکول‌ها داشته و مبنای تحلیل بسیاری از خواص فزیک، کیمیاوی و ترمودینامیکی سیستم‌های گازی به‌شمار می‌رود. در این تحقیق، سطح انرژی پوتنسیل بین‌المالیکولی سیستم  $N_2-SO$  با استفاده از روش CCSD(T) و سیت اساسی aug-cc-pVTZ بررسی گردیده است. محاسبات بین‌المالیکولی ۲ تا ۸ انگستروم با گام‌های ۰٫۱ انگستروم انجام شده و اثر جهت‌گیری نسبی دو مونومیر با در نظر گرفتن زوایای فضایی مختلف مورد مطالعه قرار گرفته است. منحنی‌های انرژی پوتنسیل به‌دست آمده دارای نواحی جاذبه و دافعه بوده و تشکیل گودال پوتنسیل مشخصی را نشان می‌دهند که بیانگر ماهیت اثر متقابل و اندروالسی در این سیستم است. همچنان طول رابطه مونومیرهای  $N_2$  و  $SO$  در هر نقطه به‌ترساز شده است. سطوح انرژی پوتنسیل بین‌المالیکولی در زوایای مختلف دو مونومیر نسبت به یکدیگر محاسبه شده اند و روند تغییرات عمق گودال پوتنسیل، پهنا در نیمه راه عمق گودال پوتنسیل، موقعیت گودال پوتنسیل و قطر برخورد کره سخت بررسی گردیده است. نتایج نشان می‌دهد که بیشترین عمق گودال پوتنسیل در زاویه ۹۰ درجه و کمترین آن در زاویه ۱۸۰ درجه را دارد. همچنین مقایسه نتایج نشان می‌دهد که عمق گودال پوتنسیل در حالت اصلاح نشده بزرگتر و موقعیت حد اقل انرژی در فواصل کوتاه‌تر نسبت به حالت اصلاح شده است. سطح انرژی پوتنسیل بین‌المالیکولی سیستم  $N_2-SO$  به فاصله بین‌المالیکولی و جهت‌گیری فضایی در حالت اصلاح شده و اصلاح نشده به فاصله بین‌المالیکولی و جهت‌گیری‌های

<sup>۱</sup> و <sup>۲</sup> اعضای کادر علمی دیپارتمنت کیمیاوی پوهنخی تعلیم و تربیه پوهنتون سرپل.

<sup>۳</sup> عضو کادر علمی دیپارتمنت کیمیاوی عمومی پوهنخی انجینری صنایع کیمیاوی پوهنتون جوزجان.

ایمیل آدرس نویسنده مسئول: [mhashimabedi199@gmail.com](mailto:mhashimabedi199@gmail.com)

شماره تماس: ۰۷۸۲۸۴۸۲۶۸

مختلف دو مونومیر نسبت به هم بستگی دارد. تصحیح CP برای حذف خطای ترکیب مجموعه توابع اساسی (BSSE) برای تمام محاسبات به کار برده شده است.

**کلمات کلیدی:** سطح انرژی پوتنسیل،  $N_2 - SO$ ، سیت اساسی، CCSD(T)

## مقدمه

الْحَمْدُ لِلَّهِ حَمْدًا كَثِيرًا طَيِّبًا مُبَارَكًا فِيهِ، وَالصَّلَاةُ وَالسَّلَامُ عَلَيَّ مِنْ لَدُنِّي بَعْدَهُ.

جهت توسعه بسیاری زمینه‌های کیمیاوی، فزیک و بیولوژیکی نیازمند آگاهی از سطح انرژی پوتنسیل بین‌المالیکولی برای سیستم‌های بین‌المالیکولی هستیم. با بررسی سطوح انرژی پوتنسیل (PES) درک بهتری از قوه‌های بین‌المالیکولی داشته می‌توانیم. سطح انرژی پوتنسیل نقش مهمی در محاسبات میخانیک کوانتومی دارد (Mahlanen, R., & Pakkanen, T. A. 2008). سطح انرژی پوتنسیل را میتوان با استفاده از روش‌های مانند بررسی سپکتروسکوپی (Coxon, Gough, D. W., Maitland. et al; 1972)، دیفرکشن اشعه مالیکولی (Chapman, W. B. et al; 1996)، و یا دیتاهای مربوط به سرعت صوت (TRUSLER, B. J., & ZARARI, W. W. A) M. 1997 تعیین کرد.

با توجه به انکشاف و پیشرفت چشمگیری که اخیراً در روش‌های نظری برای تعیین پوتنسیل بین‌المالیکولی صورت گرفته است. استفاده از آن‌ها در سال‌های اخیر رو به افزایش است. از جمله روش‌های محاسباتی، روش از اساس است (Mahlanen, R., & Pakkanen, T. A. 2008) که در آن‌ها هزاران موقعیت هندسی سیستم در نظر گرفته می‌شود. با محاسبات از اساس، معلومات کامل را می‌توان راجع به سطوح انرژی به دست آورد که از روش دیگر عملاً غیر ممکن است.

انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل عموماً به سه عامل ۱- سطح نظری محاسبات؛ ۲- سیت اساسی به کار برده شده ۳- هندسه مالیکول‌ها بستگی دارد. (Noorbala, M. R, & Sabzyan, H. 2004).

از جمله محاسبات کوانتومی که در سال‌های اخیر برای محاسبه تأثیر متقابل بین‌المالیکولی سیستم‌های دو اتمی و چندین اتمی صورت گرفته است، می‌توان به مطالعه سیستم‌های Ar-HCl (صادقی و همکاران. ۱۳۹۸)،  $N_2-NO$  (Van Tat, P., & Thai Hoa, T. 2020)،  $F_2 - F_2$  و  $H_2 - F_2$  (Van, T. P., & Deiters, U. K. 2017)،  $O_2-O_2$  (Ai Nhung, N T., & Tat, P. V. 2020)،  $NeH_3^+$  (Janipour, H. et al; 2022) و  $CO_2-CO$  (Janipour, H. et al; 2023)  $HeH_3^+$  و  $ArH_3^+$

<sup>1</sup> Potantial Energy Surface.

(et al 2019) اشاره کرد. بر اساس معلومات کتابخانه‌ای به‌دست آمده تا کنون روی سیستم  $N_2 - SO$  تحقیق صورت نگرفته. بناءً در این تحقیق، پارامترهای PES این سیستم ( $N_2 - SO$ ) با استفاده از سطح نظری  $CCSD(T)/aug-cc-pVTZ$  بررسی گردیده است.

### بیان مسأله

محاسبه سطوح انرژی پوتنسیل (PESs) یک گام اولیه در بسیاری از مطالعات کاربردی علم کیمیا است. PESs نقش مهمی را در محاسبات میخانیک کوانتومی و کلاسیکی بازی می‌کنند. در حال حاضر در این زمینه محاسبات از اساس با دقت بالا انجام می‌شوند، که در آن‌ها صدها و حتی هزاران موقعیت هندسی سیستم در نظر گرفته می‌شود. با بزرگ شدن اندازه سیستم مورد نظر، هزینه‌های محاسباتی و هم چنین سطوح مورد استفاده به سرعت افزایش می‌یابد. ولی همیشه انجام محاسبات گسترده مورد نیاز، برای یکپارچه شدن مسیر PESs امکان‌پذیر نیست.

رسم سطح انرژی پوتنسیل (PES) اولین گام در بسیاری از مطالعات نظری در مورد کاربردهای کیمیاوی است. در حالی که بسیاری از PES ها به وسیله ترتیب تجربی به‌دست می‌آیند، پیشرفت چشمگیر در کیمیا کوانتومی و قدرت کمپیوتر در دو دهه گذشته رسم PES از مقادیر دقیق انرژی از اساس را به طور قابل ملاحظه امکان‌پذیر کرده است.

### سوالات تحقیق

- 1- آیا ثابت فرض کردن طول رابطه مونومیرها تأثیر قابل ملاحظه‌ای روی انرژی تأثیر متقابل بین‌المالیکولی سیستم  $N_2 - SO$  دارد؟
- 2 - آیا تصحیح CP برای  $BSSE^1$  برای استخراج منحنی‌های انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل بین‌المالیکولی برای این سیستم ضروری است؟
- 3- آیا روش  $CCSD(T)$  تأثیر قابل ملاحظه‌ای روی اثر متقابل بین‌المالیکولی سیستم  $N_2 - SO$  دارد یا خیر؟

### اهداف تحقیق

معرفی سیت اساسی و سطح نظری مناسب برای بررسی سطح انرژی پوتنسیل بین‌المالیکولی

<sup>1</sup> Basis Set Superposition Error.

سیستم  $N_2 - SO$  است. تعیین و ترتیب منحنی‌ها انرژی پوتنسیل دو بعدی و سه بعدی جهت دریافت عمق گودال، همچنین بررسی تغییرات انرژی پوتنسیل برحسب فاصله بین المالیکولی  $N_2 - SO$  به همین ترتیب تعیین مقدار انرژی پایدار کننده و ناپایدار کننده بین دو مالیکول اهداف این تحقیق می‌باشد.

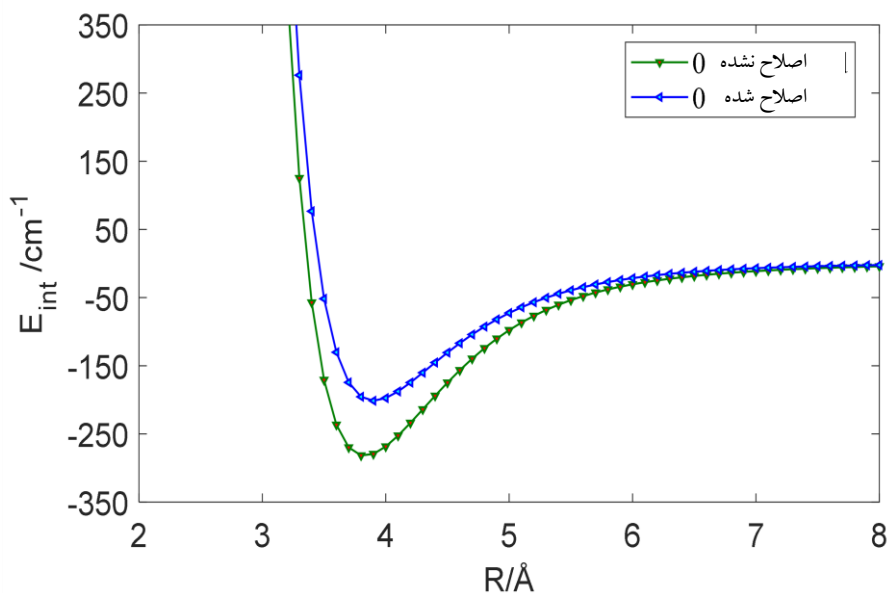
### مواد و روش کار

محاسبات سیستم نایتروجن با سلفر مونوکساید ( $N_2 - SO$ ) توسط نرم افزار گوسین با روش  $CCSD(T)$  و سیت اساسی  $aug-cc-pVTZ$  انجام شده است. برای محاسبه سطح انرژی پوتنسیل سیستم  $N_2 - SO$  با توجه به شکل (۱) و با سیت اساسی ذکر شده، اندازه زاویه  $\theta_2$  و زاویه  $\phi$  بین  $0^\circ$  و  $180^\circ$  با گام‌های  $30^\circ$  درجه انجام شده است. در این محاسبه، هفت مقدار برای زاویه  $\phi$  محاسبه شده است تا کمترین انرژی برای سیستم  $N_2 - SO$  به دست آید.

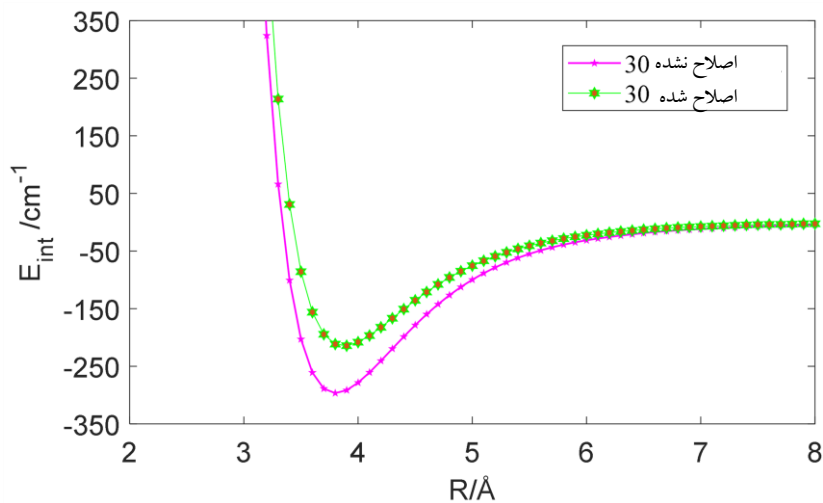
برای هر یک از مجموعه مقادیر فاصله  $R$  بین دو مونومیر ( $N_2$  و  $SO$ ) صفر درجه و برای فاصله بین دو مونومیر با گام‌های  $0.1$ ،  $0.2$ ،  $0.4$ ،  $0.6$ ،  $0.8$ ،  $1.0$ ،  $1.2$ ،  $1.4$ ،  $1.6$ ،  $1.8$ ،  $2.0$ ،  $2.2$ ،  $2.4$ ،  $2.6$ ،  $2.8$ ،  $3.0$ ،  $3.2$ ،  $3.4$ ،  $3.6$ ،  $3.8$ ،  $4.0$ ،  $4.2$ ،  $4.4$ ،  $4.6$ ،  $4.8$ ،  $5.0$ ،  $5.2$ ،  $5.4$ ،  $5.6$ ،  $5.8$ ،  $6.0$ ،  $6.2$ ،  $6.4$ ،  $6.6$ ،  $6.8$ ،  $7.0$ ،  $7.2$ ،  $7.4$ ،  $7.6$ ،  $7.8$ ،  $8.0$ ،  $8.2$ ،  $8.4$ ،  $8.6$ ،  $8.8$ ،  $9.0$ ،  $9.2$ ،  $9.4$ ،  $9.6$ ،  $9.8$ ،  $10.0$ ،  $10.2$ ،  $10.4$ ،  $10.6$ ،  $10.8$ ،  $11.0$ ،  $11.2$ ،  $11.4$ ،  $11.6$ ،  $11.8$ ،  $12.0$ ،  $12.2$ ،  $12.4$ ،  $12.6$ ،  $12.8$ ،  $13.0$ ،  $13.2$ ،  $13.4$ ،  $13.6$ ،  $13.8$ ،  $14.0$ ،  $14.2$ ،  $14.4$ ،  $14.6$ ،  $14.8$ ،  $15.0$ ،  $15.2$ ،  $15.4$ ،  $15.6$ ،  $15.8$ ،  $16.0$ ،  $16.2$ ،  $16.4$ ،  $16.6$ ،  $16.8$ ،  $17.0$ ،  $17.2$ ،  $17.4$ ،  $17.6$ ،  $17.8$ ،  $18.0$ ،  $18.2$ ،  $18.4$ ،  $18.6$ ،  $18.8$ ،  $19.0$ ،  $19.2$ ،  $19.4$ ،  $19.6$ ،  $19.8$ ،  $20.0$ ،  $20.2$ ،  $20.4$ ،  $20.6$ ،  $20.8$ ،  $21.0$ ،  $21.2$ ،  $21.4$ ،  $21.6$ ،  $21.8$ ،  $22.0$ ،  $22.2$ ،  $22.4$ ،  $22.6$ ،  $22.8$ ،  $23.0$ ،  $23.2$ ،  $23.4$ ،  $23.6$ ،  $23.8$ ،  $24.0$ ،  $24.2$ ،  $24.4$ ،  $24.6$ ،  $24.8$ ،  $25.0$ ،  $25.2$ ،  $25.4$ ،  $25.6$ ،  $25.8$ ،  $26.0$ ،  $26.2$ ،  $26.4$ ،  $26.6$ ،  $26.8$ ،  $27.0$ ،  $27.2$ ،  $27.4$ ،  $27.6$ ،  $27.8$ ،  $28.0$ ،  $28.2$ ،  $28.4$ ،  $28.6$ ،  $28.8$ ،  $29.0$ ،  $29.2$ ،  $29.4$ ،  $29.6$ ،  $29.8$ ،  $30.0$ ،  $30.2$ ،  $30.4$ ،  $30.6$ ،  $30.8$ ،  $31.0$ ،  $31.2$ ،  $31.4$ ،  $31.6$ ،  $31.8$ ،  $32.0$ ،  $32.2$ ،  $32.4$ ،  $32.6$ ،  $32.8$ ،  $33.0$ ،  $33.2$ ،  $33.4$ ،  $33.6$ ،  $33.8$ ،  $34.0$ ،  $34.2$ ،  $34.4$ ،  $34.6$ ،  $34.8$ ،  $35.0$ ،  $35.2$ ،  $35.4$ ،  $35.6$ ،  $35.8$ ،  $36.0$ ،  $36.2$ ،  $36.4$ ،  $36.6$ ،  $36.8$ ،  $37.0$ ،  $37.2$ ،  $37.4$ ،  $37.6$ ،  $37.8$ ،  $38.0$ ،  $38.2$ ،  $38.4$ ،  $38.6$ ،  $38.8$ ،  $39.0$ ،  $39.2$ ،  $39.4$ ،  $39.6$ ،  $39.8$ ،  $40.0$ ،  $40.2$ ،  $40.4$ ،  $40.6$ ،  $40.8$ ،  $41.0$ ،  $41.2$ ،  $41.4$ ،  $41.6$ ،  $41.8$ ،  $42.0$ ،  $42.2$ ،  $42.4$ ،  $42.6$ ،  $42.8$ ،  $43.0$ ،  $43.2$ ،  $43.4$ ،  $43.6$ ،  $43.8$ ،  $44.0$ ،  $44.2$ ،  $44.4$ ،  $44.6$ ،  $44.8$ ،  $45.0$ ،  $45.2$ ،  $45.4$ ،  $45.6$ ،  $45.8$ ،  $46.0$ ،  $46.2$ ،  $46.4$ ،  $46.6$ ،  $46.8$ ،  $47.0$ ،  $47.2$ ،  $47.4$ ،  $47.6$ ،  $47.8$ ،  $48.0$ ،  $48.2$ ،  $48.4$ ،  $48.6$ ،  $48.8$ ،  $49.0$ ،  $49.2$ ،  $49.4$ ،  $49.6$ ،  $49.8$ ،  $50.0$ ،  $50.2$ ،  $50.4$ ،  $50.6$ ،  $50.8$ ،  $51.0$ ،  $51.2$ ،  $51.4$ ،  $51.6$ ،  $51.8$ ،  $52.0$ ،  $52.2$ ،  $52.4$ ،  $52.6$ ،  $52.8$ ،  $53.0$ ،  $53.2$ ،  $53.4$ ،  $53.6$ ،  $53.8$ ،  $54.0$ ،  $54.2$ ،  $54.4$ ،  $54.6$ ،  $54.8$ ،  $55.0$ ،  $55.2$ ،  $55.4$ ،  $55.6$ ،  $55.8$ ،  $56.0$ ،  $56.2$ ،  $56.4$ ،  $56.6$ ،  $56.8$ ،  $57.0$ ،  $57.2$ ،  $57.4$ ،  $57.6$ ،  $57.8$ ،  $58.0$ ،  $58.2$ ،  $58.4$ ،  $58.6$ ،  $58.8$ ،  $59.0$ ،  $59.2$ ،  $59.4$ ،  $59.6$ ،  $59.8$ ،  $60.0$ ،  $60.2$ ،  $60.4$ ،  $60.6$ ،  $60.8$ ،  $61.0$ ،  $61.2$ ،  $61.4$ ،  $61.6$ ،  $61.8$ ،  $62.0$ ،  $62.2$ ،  $62.4$ ،  $62.6$ ،  $62.8$ ،  $63.0$ ،  $63.2$ ،  $63.4$ ،  $63.6$ ،  $63.8$ ،  $64.0$ ،  $64.2$ ،  $64.4$ ،  $64.6$ ،  $64.8$ ،  $65.0$ ،  $65.2$ ،  $65.4$ ،  $65.6$ ،  $65.8$ ،  $66.0$ ،  $66.2$ ،  $66.4$ ،  $66.6$ ،  $66.8$ ،  $67.0$ ،  $67.2$ ،  $67.4$ ،  $67.6$ ،  $67.8$ ،  $68.0$ ،  $68.2$ ،  $68.4$ ،  $68.6$ ،  $68.8$ ،  $69.0$ ،  $69.2$ ،  $69.4$ ،  $69.6$ ،  $69.8$ ،  $70.0$ ،  $70.2$ ،  $70.4$ ،  $70.6$ ،  $70.8$ ،  $71.0$ ،  $71.2$ ،  $71.4$ ،  $71.6$ ،  $71.8$ ،  $72.0$ ،  $72.2$ ،  $72.4$ ،  $72.6$ ،  $72.8$ ،  $73.0$ ،  $73.2$ ،  $73.4$ ،  $73.6$ ،  $73.8$ ،  $74.0$ ،  $74.2$ ،  $74.4$ ،  $74.6$ ،  $74.8$ ،  $75.0$ ،  $75.2$ ،  $75.4$ ،  $75.6$ ،  $75.8$ ،  $76.0$ ،  $76.2$ ،  $76.4$ ،  $76.6$ ،  $76.8$ ،  $77.0$ ،  $77.2$ ،  $77.4$ ،  $77.6$ ،  $77.8$ ،  $78.0$ ،  $78.2$ ،  $78.4$ ،  $78.6$ ،  $78.8$ ،  $79.0$ ،  $79.2$ ،  $79.4$ ،  $79.6$ ،  $79.8$ ،  $80.0$ ،  $80.2$ ،  $80.4$ ،  $80.6$ ،  $80.8$ ،  $81.0$ ،  $81.2$ ،  $81.4$ ،  $81.6$ ،  $81.8$ ،  $82.0$ ،  $82.2$ ،  $82.4$ ،  $82.6$ ،  $82.8$ ،  $83.0$ ،  $83.2$ ،  $83.4$ ،  $83.6$ ،  $83.8$ ،  $84.0$ ،  $84.2$ ،  $84.4$ ،  $84.6$ ،  $84.8$ ،  $85.0$ ،  $85.2$ ،  $85.4$ ،  $85.6$ ،  $85.8$ ،  $86.0$ ،  $86.2$ ،  $86.4$ ،  $86.6$ ،  $86.8$ ،  $87.0$ ،  $87.2$ ،  $87.4$ ،  $87.6$ ،  $87.8$ ،  $88.0$ ،  $88.2$ ،  $88.4$ ،  $88.6$ ،  $88.8$ ،  $89.0$ ،  $89.2$ ،  $89.4$ ،  $89.6$ ،  $89.8$ ،  $90.0$ ،  $90.2$ ،  $90.4$ ،  $90.6$ ،  $90.8$ ،  $91.0$ ،  $91.2$ ،  $91.4$ ،  $91.6$ ،  $91.8$ ،  $92.0$ ،  $92.2$ ،  $92.4$ ،  $92.6$ ،  $92.8$ ،  $93.0$ ،  $93.2$ ،  $93.4$ ،  $93.6$ ،  $93.8$ ،  $94.0$ ،  $94.2$ ،  $94.4$ ،  $94.6$ ،  $94.8$ ،  $95.0$ ،  $95.2$ ،  $95.4$ ،  $95.6$ ،  $95.8$ ،  $96.0$ ،  $96.2$ ،  $96.4$ ،  $96.6$ ،  $96.8$ ،  $97.0$ ،  $97.2$ ،  $97.4$ ،  $97.6$ ،  $97.8$ ،  $98.0$ ،  $98.2$ ،  $98.4$ ،  $98.6$ ،  $98.8$ ،  $99.0$ ،  $99.2$ ،  $99.4$ ،  $99.6$ ،  $99.8$ ،  $100.0$ ،  $100.2$ ،  $100.4$ ،  $100.6$ ،  $100.8$ ،  $101.0$ ،  $101.2$ ،  $101.4$ ،  $101.6$ ،  $101.8$ ،  $102.0$ ،  $102.2$ ،  $102.4$ ،  $102.6$ ،  $102.8$ ،  $103.0$ ،  $103.2$ ،  $103.4$ ،  $103.6$ ،  $103.8$ ،  $104.0$ ،  $104.2$ ،  $104.4$ ،  $104.6$ ،  $104.8$ ،  $105.0$ ،  $105.2$ ،  $105.4$ ،  $105.6$ ،  $105.8$ ،  $106.0$ ،  $106.2$ ،  $106.4$ ،  $106.6$ ،  $106.8$ ،  $107.0$ ،  $107.2$ ،  $107.4$ ،  $107.6$ ،  $107.8$ ،  $108.0$ ،  $108.2$ ،  $108.4$ ،  $108.6$ ،  $108.8$ ،  $109.0$ ،  $109.2$ ،  $109.4$ ،  $109.6$ ،  $109.8$ ،  $110.0$ ،  $110.2$ ،  $110.4$ ،  $110.6$ ،  $110.8$ ،  $111.0$ ،  $111.2$ ،  $111.4$ ،  $111.6$ ،  $111.8$ ،  $112.0$ ،  $112.2$ ،  $112.4$ ،  $112.6$ ،  $112.8$ ،  $113.0$ ،  $113.2$ ،  $113.4$ ،  $113.6$ ،  $113.8$ ،  $114.0$ ،  $114.2$ ،  $114.4$ ،  $114.6$ ،  $114.8$ ،  $115.0$ ،  $115.2$ ،  $115.4$ ،  $115.6$ ،  $115.8$ ،  $116.0$ ،  $116.2$ ،  $116.4$ ،  $116.6$ ،  $116.8$ ،  $117.0$ ،  $117.2$ ،  $117.4$ ،  $117.6$ ،  $117.8$ ،  $118.0$ ،  $118.2$ ،  $118.4$ ،  $118.6$ ،  $118.8$ ،  $119.0$ ،  $119.2$ ،  $119.4$ ،  $119.6$ ،  $119.8$ ،  $120.0$ ،  $120.2$ ،  $120.4$ ،  $120.6$ ،  $120.8$ ،  $121.0$ ،  $121.2$ ،  $121.4$ ،  $121.6$ ،  $121.8$ ،  $122.0$ ،  $122.2$ ،  $122.4$ ،  $122.6$ ،  $122.8$ ،  $123.0$ ،  $123.2$ ،  $123.4$ ،  $123.6$ ،  $123.8$ ،  $124.0$ ،  $124.2$ ،  $124.4$ ،  $124.6$ ،  $124.8$ ،  $125.0$ ،  $125.2$ ،  $125.4$ ،  $125.6$ ،  $125.8$ ،  $126.0$ ،  $126.2$ ،  $126.4$ ،  $126.6$ ،  $126.8$ ،  $127.0$ ،  $127.2$ ،  $127.4$ ،  $127.6$ ،  $127.8$ ،  $128.0$ ،  $128.2$ ،  $128.4$ ،  $128.6$ ،  $128.8$ ،  $129.0$ ،  $129.2$ ،  $129.4$ ،  $129.6$ ،  $129.8$ ،  $130.0$ ،  $130.2$ ،  $130.4$ ،  $130.6$ ،  $130.8$ ،  $131.0$ ،  $131.2$ ،  $131.4$ ،  $131.6$ ،  $131.8$ ،  $132.0$ ،  $132.2$ ،  $132.4$ ،  $132.6$ ،  $132.8$ ،  $133.0$ ،  $133.2$ ،  $133.4$ ،  $133.6$ ،  $133.8$ ،  $134.0$ ،  $134.2$ ،  $134.4$ ،  $134.6$ ،  $134.8$ ،  $135.0$ ،  $135.2$ ،  $135.4$ ،  $135.6$ ،  $135.8$ ،  $136.0$ ،  $136.2$ ،  $136.4$ ،  $136.6$ ،  $136.8$ ،  $137.0$ ،  $137.2$ ،  $137.4$ ،  $137.6$ ،  $137.8$ ،  $138.0$ ،  $138.2$ ،  $138.4$ ،  $138.6$ ،  $138.8$ ،  $139.0$ ،  $139.2$ ،  $139.4$ ،  $139.6$ ،  $139.8$ ،  $140.0$ ،  $140.2$ ،  $140.4$ ،  $140.6$ ،  $140.8$ ،  $141.0$ ،  $141.2$ ،  $141.4$ ،  $141.6$ ،  $141.8$ ،  $142.0$ ،  $142.2$ ،  $142.4$ ،  $142.6$ ،  $142.8$ ،  $143.0$ ،  $143.2$ ،  $143.4$ ،  $143.6$ ،  $143.8$ ،  $144.0$ ،  $144.2$ ،  $144.4$ ،  $144.6$ ،  $144.8$ ،  $145.0$ ،  $145.2$ ،  $145.4$ ،  $145.6$ ،  $145.8$ ،  $146.0$ ،  $146.2$ ،  $146.4$ ،  $146.6$ ،  $146.8$ ،  $147.0$ ،  $147.2$ ،  $147.4$ ،  $147.6$ ،  $147.8$ ،  $148.0$ ،  $148.2$ ،  $148.4$ ،  $148.6$ ،  $148.8$ ،  $149.0$ ،  $149.2$ ،  $149.4$ ،  $149.6$ ،  $149.8$ ،  $150.0$ ،  $150.2$ ،  $150.4$ ،  $150.6$ ،  $150.8$ ،  $151.0$ ،  $151.2$ ،  $151.4$ ،  $151.6$ ،  $151.8$ ،  $152.0$ ،  $152.2$ ،  $152.4$ ،  $152.6$ ،  $152.8$ ،  $153.0$ ،  $153.2$ ،  $153.4$ ،  $153.6$ ،  $153.8$ ،  $154.0$ ،  $154.2$ ،  $154.4$ ،  $154.6$ ،  $154.8$ ،  $155.0$ ،  $155.2$ ،  $155.4$ ،  $155.6$ ،  $155.8$ ،  $156.0$ ،  $156.2$ ،  $156.4$ ،  $156.6$ ،  $156.8$ ،  $157.0$ ،  $157.2$ ،  $157.4$ ،  $157.6$ ،  $157.8$ ،  $158.0$ ،  $158.2$ ،  $158.4$ ،  $158.6$ ،  $158.8$ ،  $159.0$ ،  $159.2$ ،  $159.4$ ،  $159.6$ ،  $159.8$ ،  $160.0$ ،  $160.2$ ،  $160.4$ ،  $160.6$ ،  $160.8$ ،  $161.0$ ،  $161.2$ ،  $161.4$ ،  $161.6$ ،  $161.8$ ،  $162.0$ ،  $162.2$ ،  $162.4$ ،  $162.6$ ،  $162.8$ ،  $163.0$ ،  $163.2$ ،  $163.4$ ،  $163.6$ ،  $163.8$ ،  $164.0$ ،  $164.2$ ،  $164.4$ ،  $164.6$ ،  $164.8$ ،  $165.0$ ،  $165.2$ ،  $165.4$ ،  $165.6$ ،  $165.8$ ،  $166.0$ ،  $166.2$ ،  $166.4$ ،  $166.6$ ،  $166.8$ ،  $167.0$ ،  $167.2$ ،  $167.4$ ،  $167.6$ ،  $167.8$ ،  $168.0$ ،  $168.2$ ،  $168.4$ ،  $168.6$ ،  $168.8$ ،  $169.0$ ،  $169.2$ ،  $169.4$ ،  $169.6$ ،  $169.8$ ،  $170.0$ ،  $170.2$ ،  $170.4$ ،  $170.6$ ،  $170.8$ ،  $171.0$ ،  $171.2$ ،  $171.4$ ،  $171.6$ ،  $171.8$ ،  $172.0$ ،  $172.2$ ،  $172.4$ ،  $172.6$ ،  $172.8$ ،  $173.0$ ،  $173.2$ ،  $173.4$ ،  $173.6$ ،  $173.8$ ،  $174.0$ ،  $174.2$ ،  $174.4$ ،  $174.6$ ،  $174.8$ ،  $175.0$ ،  $175.2$ ،  $175.4$ ،  $175.6$ ،  $175.8$ ،  $176.0$ ،  $176.2$ ،  $176.4$ ،  $176.6$ ،  $176.8$ ،  $177.0$ ،  $177.2$ ،  $177.4$ ،  $177.6$ ،  $177.8$ ،  $178.0$ ،  $178.2$ ،  $178.4$ ،  $178.6$ ،  $178.8$ ،  $179.0$ ،  $179.2$ ،  $179.4$ ،  $179.6$ ،  $179.8$ ،  $180.0$ ،  $180.2$ ،  $180.4$ ،  $180.6$ ،  $180.8$ ،  $181.0$ ،  $181.2$ ،  $181.4$ ،  $181.6$ ،  $181.8$ ،  $182.0$ ،  $182.2$ ،  $182.4$ ،  $182.6$ ،  $182.8$ ،  $183.0$ ،  $183.2$ ،  $183.4$ ،  $183.6$ ،  $183.8$ ،  $184.0$ ،  $184.2$ ،  $184.4$ ،  $184.6$ ،  $184.8$ ،  $185.0$ ،  $185.2$ ،  $185.4$ ،  $185.6$ ،  $185.8$ ،  $186.0$ ،  $186.2$ ،  $186.4$ ،  $186.6$ ،  $186.8$ ،  $187.0$ ،  $187.2$ ،  $187.4$ ،  $187.6$ ،  $187.8$ ،  $188.0$ ،  $188.2$ ،  $188.4$ ،  $188.6$ ،  $188.8$ ،  $189.0$ ،  $189.2$ ،  $189.4$ ،  $189.6$ ،  $189.8$ ،  $190.0$ ،  $190.2$ ،  $190.4$ ،  $190.6$ ،  $190.8$ ،  $191.0$ ،  $191.2$ ،  $191.4$ ،  $191.6$ ،  $191.8$ ،  $192.0$ ،  $192.2$ ،  $192.4$ ،  $192.6$ ،  $192.8$ ،  $193.0$ ،  $193.2$ ،  $193.4$ ،  $193.6$ ،  $193.8$ ،  $194.0$ ،  $194.2$ ،  $194.4$ ،  $194.6$ ،  $194.8$ ،  $195.0$ ،  $195.2$ ،  $195.4$ ،  $195.6$ ،  $195.8$ ،  $196.0$ ،  $196.2$ ،  $196.4$ ،  $196.6$ ،  $196.8$ ،  $197.0$ ،  $197.2$ ،  $197.4$ ،  $197.6$ ،  $197.8$ ،  $198.0$ ،  $198.2$ ،  $198.4$ ،  $198.6$ ،  $198.8$ ،  $199.0$ ،  $199.2$ ،  $199.4$ ،  $199.6$ ،  $199.8$ ،  $200.0$ ،  $200.2$ ،  $200.4$ ،  $200.6$ ،  $200.8$ ،  $201.0$ ،  $201.2$ ،  $201.4$ ،  $201.6$ ،  $201.8$ ،  $202.0$ ،  $202.2$ ،  $202.4$ ،  $202.6$ ،  $202.8$ ،  $203.0$ ،  $203.2$ ،  $203.4$ ،  $203.6$ ،  $203.8$ ،  $204.0$ ،  $204.2$ ،  $204.4$ ،  $204.6$ ،  $204.8$ ،  $205.0$ ،  $205.2$ ،  $$

$SO$  - در نظر گرفته شده اند. در سستم فوق، طول رابطه  $SO$  و  $N_2$ ، یعنی  $R_2$  و  $R_3$  آزاد گذاشته شده تا بهترسازی گردد. تغییرات  $R_2$  و  $R_3$  به عنوان تابعی از  $R$  در مقابل مقادیر مختلف از زوایای  $\theta_2$  و  $\phi$  بررسی می‌شود. برای اختصار، نتایج مربوطه به تغییرات  $R_2$  و  $R_3$  برای یک مقدار زاویه دو وجهی  $\theta_2 = 90^\circ$  هفت مقدار یا هفت جهت‌های مختلف یعنی:  $0^\circ$ ،  $30^\circ$ ،  $60^\circ$ ،  $90^\circ$ ،  $120^\circ$ ،  $150^\circ$  و  $180^\circ$  محاسبه شده است. تصحیح  $CP$  برای حذف خطای  $BSSE$  برای تمام محاسبات به کار برده شده است. در این بررسی طول رابطه مونومیرها در تمام فواصل بین دو مونومیر یکسان فرض می‌شود. همچنین منحنی‌ها و پارامترهای مربوط به آن، عمق گودال پوتنسیل  $D_e$ ، موقعیت گودال پوتنسیل  $R_e$ ، پهنای آن در نیمه راه عمق  $\Delta R_{\frac{1}{2}}$  و قطر برخورد کره سخت  $\sigma$  در حالت اصلاح شده و اصلاح نشده مورد بررسی قرار گرفته که مقادیر آن‌ها در جدول (۱) آورده شده است.

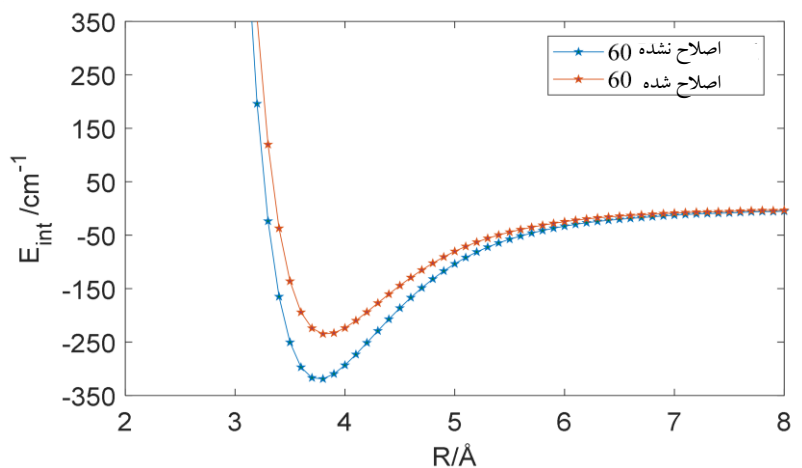
منحنی‌های انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل بین‌المالیکولی اصلاح نشده و اصلاح شده سیستم  $N_2-SO$  در شکل‌های ۲، ۳، ۴، ۵، ۶، ۷ و ۸ نشان داده شده است. همان‌طوریکه واضح است منحنی‌های انرژی پوتنسیل هم دارای قسمت دافعه‌ی و هم دارای قسمت جاذبه‌ی می‌باشند.



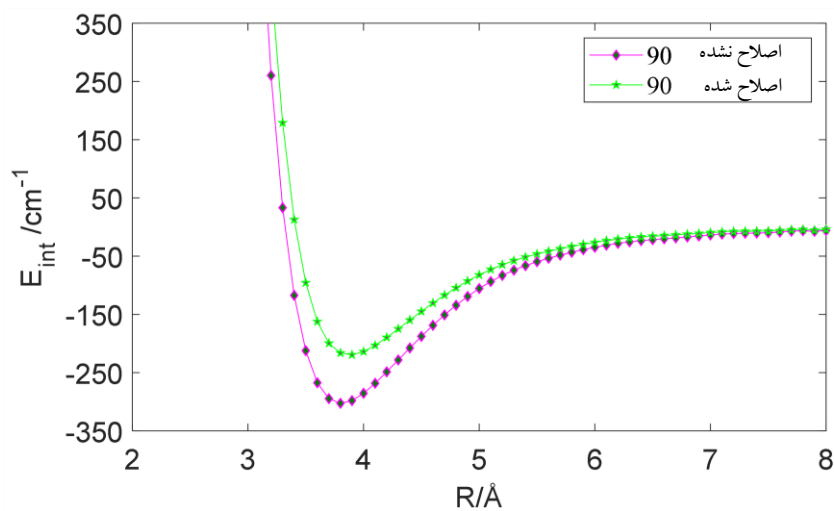
شکل (۲) انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل بین‌المالیکولی  $N_2-SO$  برحسب فاصله بین‌المالیکولی،  $R$ ، برای  $\phi$  ثابت  $0$  درجه و منحنی بالایی و پایینی به ترتیب به پوتنسیل‌های اصلاح نشده و اصلاح شده مربوط می‌باشد.



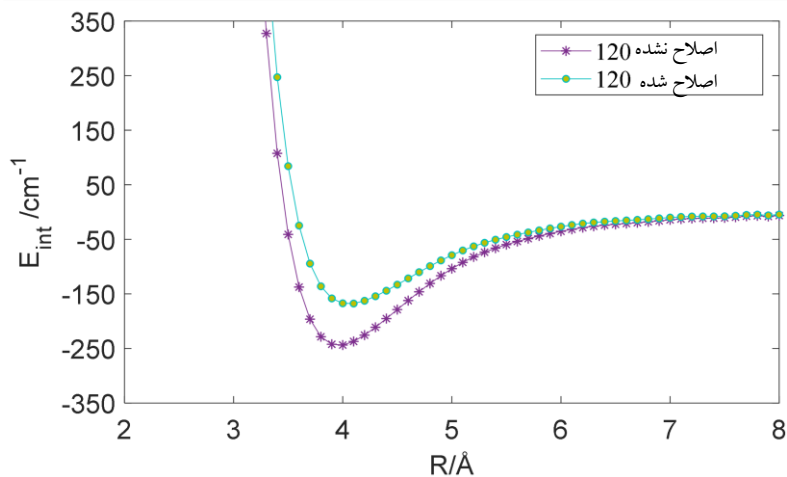
شکل (۳) انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل بین المالیکولی  $N_2-SO$  برحسب فاصله بین المالیکولی  $R$ ، برای  $\phi$  ثابت  $30^\circ$  درجه و منحنی بالایی و پایینی به ترتیب به پوتنسیل های اصلاح نشده و اصلاح شده مربوط می باشد



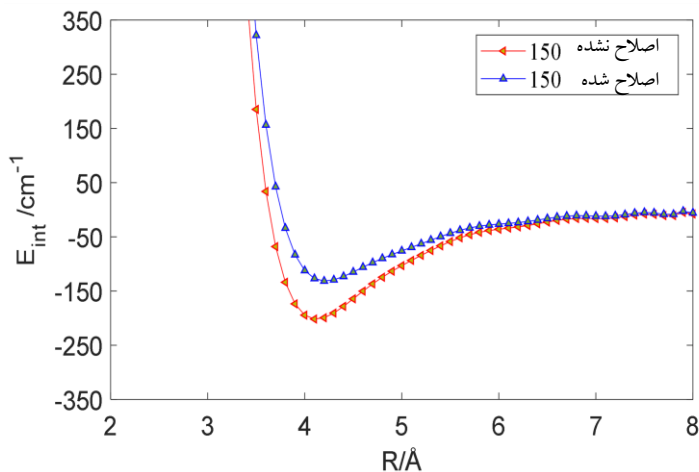
شکل (۴) انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل بین المالیکولی  $N_2-SO$  برحسب فاصله بین المالیکولی  $R$ ، برای  $\phi$  ثابت  $60^\circ$  درجه و منحنی بالایی و پایینی به ترتیب به پوتنسیل های اصلاح نشده و اصلاح شده مربوط می باشد.



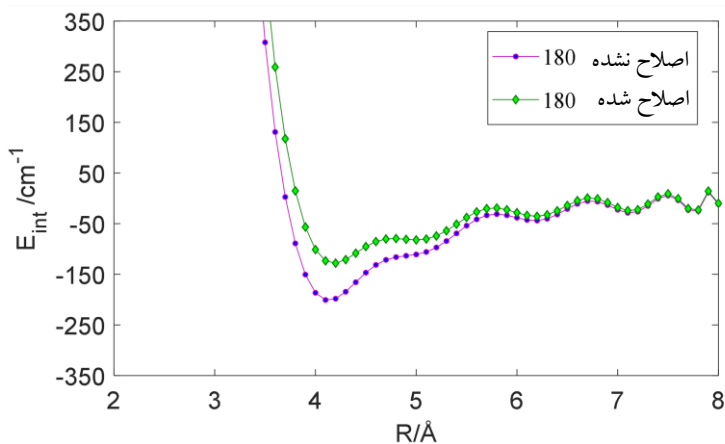
شکل (۵) انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل بین‌المالیکولی  $N_2-SO$  برحسب فاصله بین‌المالیکولی،  $R$ ، برای  $\phi$  ثابت ۹۰ درجه و منحنی بالایی و پایینی به ترتیب به پوتنسیل‌های اصلاح نشده و اصلاح شده مربوط می‌باشد.



شکل (۶) انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل بین‌المالیکولی  $N_2-SO$  برحسب فاصله بین‌المالیکولی،  $R$ ، برای  $\phi$  ثابت ۱۲۰ درجه و منحنی بالایی و پایینی به ترتیب به پوتنسیل‌های اصلاح نشده و اصلاح شده مربوط می‌باشد.



شکل (۷) انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل بین المالیکولی  $N_2 - SO$  برحسب فاصله بین المالیکولی،  $R$ ، برای  $\phi$  ثابت  $150^\circ$  درجه و منحنی بالایی و پایینی به ترتیب به پوتنسیل های اصلاح نشده و اصلاح شده مربوط می باشد.



شکل (۸) انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل بین المالیکولی  $N_2 - SO$  برحسب فاصله بین المالیکولی،  $R$ ، برای  $\phi$  ثابت  $180^\circ$  درجه و منحنی بالایی و پایینی به ترتیب به پوتنسیل های اصلاح نشده و اصلاح شده مربوط می باشد.

### روند تغییر $D_e$ ، $R_e$ ، $\Delta R_{\frac{1}{2}}$ و $\sigma$ انرژی پوتنسیل اصلاح نشده و اصلاح شده نسبت به

#### $\phi$ در $\theta_2$ ثابت

برای بررسی روند تابعیت مشخصه منحنی های انرژی پوتنسیل از زاویه دو وجهی  $\theta_2 = 90^\circ$ ، فقط یک مقدار زاویه  $\phi$  با تغییرات جهت گیری دایمیر سیستم  $N_2 - SO$ ، انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل برحسب

فاصله بین‌المالیکولی R بررسی گردیده. مقادیر زاویه  $\phi$  برابر با  $0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 150^\circ$  و  $180^\circ$  انتخاب شده است.

جدول (۱) مقادیر عمق گودال پوتنسیل  $D_e$ ، موقعیت گودال پوتنسیل  $R_e$ ، و پهنای آن در نیمه راه عمق  $\Delta R_{1/2}$  و قطر کره سخت  $\sigma$  برای سیستم  $N_2-SO$  بر اساس پوتنسیل محاسبه شده اصلاح نشده و اصلاح شده با استفاده از روش CCSD(T) و سایت اساسی  $\theta_2 = 90^\circ$  aug-cc-pVT. کمیت  $D_e$  برحسب  $cm^{-1}$  و کمیت‌های  $R_e$ ،  $\Delta R_{1/2}$  و  $\sigma$  بر حسب انگستروم می‌باشند.

$\theta_2 = 90^\circ$	IPS	$D_e$	$R_e$	$\Delta D_{1/2}$	$\sigma$
$\phi = 0^\circ$	اصلاح نشده	-212.18	3.60	1.21	3.17
	اصلاح شده	-147.83	3.70	2.85	3.27
$\phi = 30^\circ$	اصلاح نشده	-220.34	3.60	2.63	3.15
	اصلاح شده	-154.74	3.70	2.67	3.24
$\phi = 60^\circ$	اصلاح نشده	-257.78	3.50	2.37	3.05
	اصلاح شده	-172.41	3.60	2.44	3.19
$\phi = 90^\circ$	اصلاح نشده	-257.78	3.50	2.37	3.05
	اصلاح شده	-185.93	3.60	2.42	3.15
$\phi = 120^\circ$	اصلاح نشده	-244.50	3.60	1.81	3.07
	اصلاح شده	-171.10	3.60	2.47	3.18
$\phi = 150^\circ$	اصلاح نشده	-241.63	3.60	1.24	3.13
	اصلاح شده	-161.24	3.70	2.84	3.22
$\phi = 180^\circ$	اصلاح نشده	-237.78	3.60	1.24	3.16
	اصلاح شده	-157.42	3.70	1.20	3.26

طوری‌که در جدول فوق ملاحظه می‌شود بیشترین عمق گودال پوتنسیل مربوط به زاویه  $90^\circ$  است و کمترین عمق گودال پوتنسیل به دست آمده برای پوتنسیل اصلاح شده و اصلاح نشده مربوط به زاویه  $180^\circ$  است.

در جدول ۱ و شکل‌های ۲، ۳، ۴، ۵، ۶، ۷ و ۸ ملاحظه می‌شود که در زاویه  $\theta_2 = 90^\circ$  از  $0^\circ$  تا زاویه  $90^\circ$  اصلاح نشده و اصلاح شده کاهش و سپس افزایش می‌یابد. این پارامتر در زاویای  $60^\circ$  و  $90^\circ$  مساوی اند. روند ذیل برای تغییرات عمق گودال پوتنسیل نسبت به تغییرات  $\phi$  در این زاویه  $\theta_2$  به دست می‌آید.

$$D_e(\phi): 0^\circ > 30^\circ > 60^\circ = 90^\circ < 120^\circ = 150^\circ < 180^\circ$$

$$D_e(\phi) \text{ اصلاح شده: } 0^\circ > 30^\circ > 60^\circ = 90^\circ < 120^\circ < 150^\circ < 180^\circ$$

این روند در موقعیت عمق گودال پوتنسیل  $R_e$  اصلاح نشده و اصلاح شده، زاویه  $30^\circ$  بیشتر از  $60^\circ$  است و بقیه زوایا باهم مساوی بوده که به صورت ذیل است..

$$R_e(\phi) \text{ اصلاح نشده: } 0^\circ = 30^\circ > 60^\circ = 90^\circ < 120^\circ = 150^\circ = 180^\circ$$

$$R_e(\phi) \text{ اصلاح شده: } 0^\circ = 30^\circ > 60^\circ = 90^\circ < 120^\circ = 150^\circ = 180^\circ$$

به همین ترتیب روند تغییرات در پهنای نیمه راه عمق  $\Delta R_{\frac{1}{2}}$  اصلاح نشده و اصلاح شده، طوری ذیل می باشد.

$$\Delta R_{\frac{1}{2}}(\phi) \text{ اصلاح نشده: } 0^\circ < 30^\circ > 60^\circ = 90^\circ < 120^\circ > 150^\circ = 180^\circ$$

$$\Delta R_{\frac{1}{2}}(\phi) \text{ اصلاح شده: } 0^\circ > 30^\circ > 60^\circ = 90^\circ < 120^\circ < 150^\circ > 180^\circ$$

همچنان این روند در قطر کره سخت  $\sigma$  اصلاح نشده و اصلاح شده، به صورت ذیل می باشد.

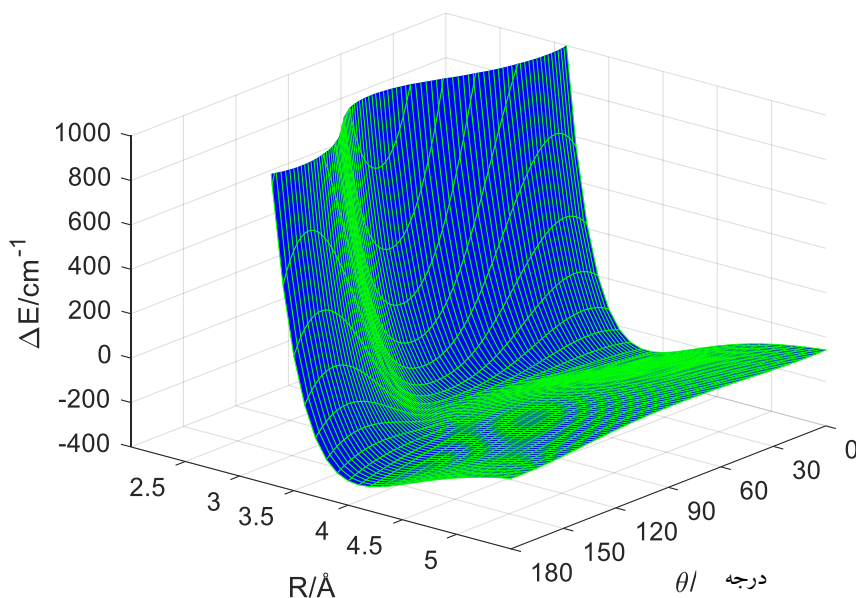
$$\sigma(\phi) \text{ اصلاح نشده: } 0^\circ > 30^\circ > 60^\circ = 90^\circ < 120^\circ < 150^\circ > 180^\circ$$

$$\sigma(\phi) \text{ اصلاح شده: } 0^\circ > 30^\circ > 60^\circ > 90^\circ < 120^\circ < 150^\circ < 180^\circ$$

نتایج این بررسی ها برای مقایسه راحت تر در جدول (۱) مربوط پوتنسیل های اصلاح شده و اصلاح نشده آورده شده است.

### سطح انرژی پوتنسیل برای سیستم $N_2 - SO$

انرژی تأثیر متقابل بین المالیکولی برای سیستم  $N_2 - SO$  بر اساس تابعی از سه متغیر  $\phi$ ،  $\theta_2$  و  $R$  در چندین موقعیت فضایی مختلف به دست آمده است. برای رسم منحنی سه بعدی زاویه ثابت  $\theta_2$  نگه داشته شده است و انرژی پوتنسیل تأثیر متقابل بر اساس تغییر دو متغیر دیگر یعنی  $\phi$  و  $R$  در زاویه ثابت  $\theta_2$   $0^\circ$ ،  $30^\circ$ ،  $60^\circ$ ،  $90^\circ$ ،  $120^\circ$ ،  $150^\circ$  و  $180^\circ$  برای پوتنسیل های اصلاح شده و اصلاح نشده در شکل های ۲، ۳، ۴، ۵، ۶، ۷ و ۸ ترسیم گردیده است. منحنی سه بعدی اصلاح نشده در شکل (۹) رسم است که در این شکل دو نقطه اصغری وجود دارد.


 شکل (۹) سطوح انرژی پوتنسیل بین‌المالیکولی سیستم  $N_2-SO$ 

## نتیجه‌گیری

در این تحقیق سطوح انرژی پوتنسیل بین‌المالیکولی سیستم نایترون با سلفر مونوکساید ( $N_2-SO$ ) به روش  $CCSD(T)/aug-cc-pVTZ$  محاسبه شده است. این بررسی، محاسبات از فواصل بین‌المالیکولی ۲ تا ۸ انگستروم برای جهت‌گیری‌های فضای مختلف دو مونومیر انجام شد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که اثر متقابل بین  $N_2$  و  $SO$  ماهیت واندروالسی دارد و منحنی‌های انرژی پوتنسیل شامل نواحی جاذبه و دافعه مشخص‌اند که سبب تشکیل گودال پوتنسیل می‌گردد. بررسی پارامترهای منحنی انرژی پوتنسیل شامل عمق گودال پوتنسیل ( $D_e$ )، موقعیت حد اصغری انرژی ( $R_e$ )، پهنای گودال در نیمه راه ( $\Delta R_{\frac{1}{2}}$ ) و قطر برخورد کره سخت ( $\sigma$ ) نشان می‌دهد که این پارامترها به جهت‌گیری مونومیرها وابسته است. بررسی‌ها نشان می‌دهد که بیشترین عمق گودال را زاویه  $90^\circ$  دارد. بنابراین قوی‌ترین اثر متقابل بین‌المالیکولی را این جهت‌گیری فضایی دارد، در حالی که کمترین مقدار عمق گودال پوتنسیل در زاویه  $180^\circ$  به دست آمده است و ضعیف‌ترین اثر متقابل بین‌المالیکولی را این جهت‌گیری فضایی دارد.

مقایسه نتایج پوتنسیل‌های اصلاح‌نشده و اصلاح‌شده با در نظر گرفتن تصحیح CP خطای ترکیب مجموعه توابع اساسی (BSSE) نشان داد که در حالت اصلاح‌نشده، عمق گودال پوتنسیل به‌طور

سیستما تیک بزرگتر و موقعیت حد اقل انرژی در فواصل کوتاه تری نسبت به حالت اصلاح شده قرار دارد. این موضوع اهمیت اعمال تصحیح CP را جهت دستیابی به نتایج کمی دقیق را تأیید می کند. همچنین مشخص شد که پهنا ی گودال پوتنسیل و قطر برخورد کره سخت در حالت اصلاح شده مقادیر بزرگتری نسبت به حالت اصلاح شده دارند که بیانگر تغییر در ویژگی های دینامیکی برخوردی سیستم است.

## مآخذ

صادقی، سالار و دیگران. (۱۳۹۸) محاسبه انرژی پتانسیل بین مولکولی کمپلکس واندروالسی Ar-HCl، چهارمین کنفرانس شیمی کاربردی ایران؛ انتشارات دانشگاه ارومیه.

Ai Nhung, N. T., & Tat, P. V. (2020). Calculation of thermodynamic properties of vapor-liquid equilibria using ab initio intermolecular potential energy surfaces for dimer O<sub>2</sub>-O<sub>2</sub>. *Molecular Physics*, 118(16), e1736673.

Badri, A., Shirkov, L., Jaidane, N. E., & Hochlaf, M. (2019). Explicitly correlated potential energy surface of the CO<sub>2</sub>-CO van der Waals dimer and applications. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21(28), 15871-15878.

Chapman, W. B., Schiffman, A., Hutson, J. M., & Nesbitt, D. J. (1996). Rotationally inelastic scattering in CH<sub>4</sub><sup>+</sup> He, Ne, and Ar: State-to-state cross sections via direct infrared laser absorption in crossed supersonic jets. *The Journal of chemical physics*, 105(9), 3497-3516.

Coxon, J. A. (1971). The calculation of potential energy curves of diatomic molecules: application to halogen molecules. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 11(5), 443-462.

Gough, D. W., Maitland, G. C., & Smith, E. B. (1972). The direct determination of intermolecular potential energy functions from gas viscosity measurements. *Molecular Physics*, 24 (1), 151-161.

Janipour, H., Noorbala, M. R., & Namazian, M. (2022). Calculation of the intermolecular potential energy surfaces of H e H<sub>3</sub><sup>+</sup> by means of ab initio methods. *Theoretical Chemistry Accounts*, 141(9), 45

Janipour, H., Noorbala, M. R., & Namazian, M. (2023). Intermolecular potential energy surfaces of NeH<sub>3</sub><sup>+</sup> and ArH<sub>3</sub><sup>+</sup> systems using ab initio methods. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1222, 114050

Mahlanen, R., & Pakkanen, T. A. (2008). Potential energy surface of S<sub>8</sub> dimer. *Chemical Physics Letters*, 453(1-3), 24-28.

Noorbala, M. R., & Sabzyan, H. (2004). A MP2/6-31G\* intermolecular potential energy surface for the F<sub>2</sub>-F<sub>2</sub> system. *Journal of Molecular Structure:THEOCHEM*, 678(1-3), 67-76.

TRUSLER, B. J., & ZARARI, W. W. A. M. (1997). Model intermolecular potentials

and virial coefficients determined from the speed of sound. *Molecular Physics*, 90(5), 695-704.

Van Tat, P., & Thai Hoa, T. (2020). Ab Initio Intermolecular Potential Energy Surfaces and Cross Second Virial Coefficients for the Dimer  $N_2$ -NO. *ACS omega*, 5(21), 12539-12549

Van, T. P., & Deiters, U. K. (2017). Calculation of second virial coefficients using ab initio intermolecular pair potentials for  $F_2$ - $F_2$  and  $H_2$ - $F_2$  dimers. *Chemical Physics*, 485, 67-80

---

