بسم الله الرحمن الرحیم

«اثری» کوچک است، خیلی کوچک و شاید هیچ!

اما به یاد عهد قدیم و رسم ادب

تقدیم می‌شود به:

« شهیدان گمنام هشت سال دفاع مقدس »

یادشان به خیر! جوانمردانی که بی‌ادعا بودند و نه حتی در پی این که یاد و اثری از آنها باقی بماند، خوشا به حالشان که به عهد خویش وفا کردند و به منتهای آرزویشان رسیدند و با نسیم صحرا و مادرشان حضرت زهرا (س) همراز شدند.

با سپاس ازسه وجود مقدس:

آنان که ناتوان شدند تا ما به توانایی برسیم ...

موهایشان سپید شد تا ما روسفید شویم ...

و عاشقانه سوختند تا گرمابخش وجود ما و روشنگر راهمان باشند ...

پدرانمان

مادرانمان

استادانمان

دانشگاه یزد
دانشکده علوم
گروه شیمی

پایان‌نامه
برای دریافت درجه کارشناسی ارشد
شیمی‌فیزیک

برازش سطح انرژی پتانسیل بین‌مولکولی F_2-F_2 با سطح نظری QCISD(T)/aug-cc-pVTZ و محاسبه‌ی ترازهای چرخشی مولکول F_2

استاد راهنما: دکتر محمد رضا نوربالا

استاد مشاور: دکتر محمد کمالوند

پژوهش و نگارش: معصومه مروّج

مهرماه ۱۳۹۰

چکیده

در این رساله به برازش سطح انرژی پتانسیل برهم‌کنش (IPES) سامانه‌ی F_2-F_2 پرداخته شده است. این مقادیر توسط نوربالا و درواه با روش از اساس و با سطح QCISD(T)/aug-cc-pVTZ محاسبه شده‌اند.

مطالعات نشان داده که تغییرات زاویه دو وجهی ϕ در دیمر F_2 تأثیرات کمی را بر مقادیر IPES وارد می‌کند، بنابراین با استفاده از انتگرال‌گیری عددی تابعیت IPES به زاویه ϕ حذف شده است. سپس برای فرایند برازش، IPESs در چند جمله‌ای‌های لژاندر، P_λ، و توابع قدرت شعاعی، V_λ، بسط داده شده‌است. مقادیر P_λ و V_λ محاسبه شده‌اند و با استفاده از این مقادیر یک تابع M-file مناسب در برنامه مطلب (MATLAB) طراحی شده که قادر است IPESs را برای تمام فاصله‌های بین‌مولکولی، R، (از ۲/۱ Å تا ۱۲ Å) و زاویه‌های دلخواه θ_2 محاسبه کند.

در روش دوم سعی شده است مقادیر IPESs، $V(R, \theta_2, \phi)$، در یک تابع انرژی پتانسیل مناسب برازش شود. بدین منظور ابتدا مقادیر IPESs بدون بُعد شده‌اند و سپس این مقادیر در تابع هارتری- فاک برازش شده است. علاوه‌براین در این پژوهش، ۶ تابع انرژی پتانسیل جدید به شکل V(r) پیشنهاد شده است و توانایی برازش این توابع با کمک مقادیر IPESs دیمر F_2 و دیمر O_2 بررسی شده‌اند که تطابق خوب بین نتایج برازش با مقادیر از اساس، مناسب بودن این توابع را تایید می‌کنند.

در این رساله هم‌چنین ترازهای چرخشی مولکول فلوئور با استفاده از روش از اساس و با ۱۰ سطح نظری متفاوت محاسبه شده است و تأثیر هر روش بر ترازهای چرخشی مورد بررسی قرار گرفته اند. برای انجام این محاسبات از نرم افزار LEVEL استفاده شده است و مقادیر انرژی پتانسیل مورد نیاز با نرم افزار GUASSIAN03 به‌دست آمده‌اند.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: مقدمات و مبانی نظری	۱
۱-۱) مقدمه	۲
۱-۲) شیمی کوانتومی	۴
۱-۲-۱) مبنای شیمی کوانتومی	۴
۱-۲-۲) روش‌های محاسبات مکانیک کوانتومی	۵
۱-۳) محاسبات از اساس	۶
۱-۳-۱) روش هارتری- فاک	۷
۱-۳-۲) روش‌های تصحیح همبستگی الکترونی	۸
۱-۳-۲-۱) روش‌های برهم‌کنش پیکربندی	۹
۱-۳-۲-۲) نظریه‌ی اختلال مولر- پلست	۱۰
۱-۳-۲-۳) روش خوشه‌ی جفت‌شده	۱۱
۱-۴) مجموعه پایه	۱۲
۱-۴-۱) مجموعه‌های پایه‌ی کمینه	۱۳
۱-۴-۲) مجموعه‌های پایه‌ی ظرفیت- شکافته	۱۳
۱-۴-۳) مجموعه‌های پایه‌ی همبستگی- سازگار	۱۴
۱-۵) خطاهای مجموعه پایه	۱۵
۱-۵-۱) خطای قطع مجموعه‌ی پایه	۱۵
۱-۵-۲) خطای برهم‌نهی مجموعه‌ی پایه (BSSE)	۱۵
۱-۶) نظریه‌ی اختلال تقارن- سازگار	۱۶
۱-۷) نیروهای بین‌مولکولی	۱۷
۱-۷-۱) پتانسیل برهم‌کنش برد بلند	۱۷
۱-۷-۲) پتانسیل برهم‌کنش برد کوتاه	۱۹
۱-۸) تابع انرژی پتانسیل بین‌مولکولی	۱۹

۱-۸-۱) مدل کره سخت ۱۹
۱-۸-۲) مدل مراکز نقطه‌ای جاذبه یا دافعه ۲۰
۱-۸-۳) مدل ساترلند ۲۰
۱-۸-۴) پتانسیل لنارد- جونز ۲۱
۱-۸-۴-۱) تعریف پتانسیل لنارد- جونز ۲۱
۱-۸-۴-۲) بیان‌های متفاوت پتانسیل لنارد- جونز ۲۳
۱-۸-۵) پتانسیل کیهارا ۲۴
۱-۸-۶) پتانسیل مورس ۲۴
۱-۸-۷) پتانسیل کرونا ۲۶
۱-۸-۸) پتانسیل‌های خاص ۲۶
۱-۹) برازش ۲۷
۱-۹) انواع مختلف برازش منحنی ۲۸
۱-۹-۱) برازش خطی و چندجمله‌ای ۲۸
۱-۹-۱-۱)تعریف برازش خطی و چندجمله‌ای ۲۹
۱-۹-۱-۲) دلایل عدم استفاده از چندجمله‌ای مرتبه‌ی بالا برای برازش ۲۸
۱-۹-۲) برازش هندسی ۲۹
۱-۹-۳) برازش سایر منحنی‌ها برای نقاط داده‌ها ۳۰
۱-۱۰) ایجاد یک درون‌یابی چندجمله‌ای ۳۰
۱-۱۱) مفاهیم ۳۱
۱-۱۱-۱) مربع R ۳۱
۱-۱۱-۲) ریشه‌ی میانگین مربع انحراف ۳۲
۱-۱۱-۳) خطای مطلق و خطای نسبی ۳۲
۱-۱۱-۴) اسپلاین ۳۳
۱-۱۱-۵) حداقل مربعات ۳۴
۱-۱۲) ترازهای چرخشی ۳۵

۱-۱۲-۱) مولکول‌های چرخنده‌ی خطی، متقارن، کروی و نامتقارن ۳۵
۱-۱۲-۲) مولکول‌های دواتمی و چنداتمی خطی ۳۶
۱-۱۲-۲-۱) فرکانس‌ها یا اعداد موج جهش ۳۶
۱-۱۲-۲-۲) شدت‌ها ۳۸
۱-۱۲-۲-۳) انحراف گریز از مرکز ۳۹
۱-۱۲-۲-۴) مولکول‌های دواتمی در حالت‌های ارتعاشی برانگیخته ۴۰
۱-۱۲-۳) مولکول‌های چرخنده‌ی متقارن ۴۱
۱-۱۲-۴) مولکول‌های چرخنده‌ی نامتقارن ۴۲
۱-۱۲-۵) مولکول‌های چرخنده‌ی کروی ۴۳
۱-۱۳) مولکول فلوئور ۴۴
۱-۱۳-۱۱) تاریخچه ۴۴
۱-۱۳-۲) ویژگی‌های فلوئور ۴۴
۱-۱۳-۲)کاربردهای فلوئور ۴۵
۱-۱۴) اهداف پژوهش ۴۶
۱-۱۴-۱) اهمیت و کاربردهای این پژوهش ۴۷
فصل دوم: برازش سطح انرژی پتانسیل بین‌مولکولی F_2-F_2 ۴۸
۲-۱) مقدمه ۴۹
۲-۲) جمع آوری داده‌های مورد نیاز برای برازش ۵۰
۲-۲-۱)روش محاسبات ۵۰
۲-۲-۲) هندسه‌ی مورد استفاده ۵۲
۲-۲-۳) سطح انرژی پتانسیل سامانه F_2-F_2 ۵۲
۲-۳) برازش انرژی پتانسیل برهم‌کنش دیمر F_2 به‌شکل $V(R,\Theta)$ ۵۷
۲-۳-۱) محاسبه‌ی چندجمله‌ای‌های لژاندر ۵۸
۲-۳-۲) محاسبه‌ی توابع قدرت شعاعی ۶۰
۲-۳-۳) کاهش قدم‌های توابع قدرت شعاعی ۶۸

۲-۳-۴) برازش انرژی پتانسیل برهم‌کنش دیمر F_2 با استفاده از مقادیر P_λ و V_λ ۷۰
۲-۳-۵) مقایسه‌ی نتایج برازش با داده‌های اولیه ۷۳
۲-۴) برازش سطح چهاربعدی انرژی پتانسیل برهم‌کنش دیمر F_2 ۸۲
۲-۴-۱) ساده سازی سطح چهاربعدی ۸۲
۲-۴-۲) برازش داده‌های بدون بُعد ۸۶
۲-۴-۳) محاسبه‌ی خطای مطلق برازش ۸۸
۲-۵) ارایه فرمول‌های عمومی جدیدی برای تابع انرژی پتانسیل ۹۱
۲-۵-۱) حذف تابعیت ϕ و θ_2 از IPES ۹۲
۲-۵-۲) به‌دست آوردن ۶ رابطه جدید برای تابع انرژی پتانسیل ۹۲
۲-۵-۳) ارزیابی معادلات جدید ۹۳
۲-۵-۳-۱) برازش انرژی پتانسیل برهم‌کنش با استفاده از معادلات جدید ۹۳
۲-۵-۳-۲) محاسبه‌ی مجموع مربع خطای مطلق، R^2 و RMSE ۹۶
۲-۵-۳-۳) محاسبه‌ی خطای مطلق توابع جدید ۹۷
۲-۵-۴) مقایسه معادلات جدید با معادلات هارتری- فاک ۱۰۴
۲-۶) بحث و نتیجه‌گیری ۱۰۸
فصل سوم: محاسبه‌ی انرژی ترازهای چرخشی مولکول فلوئور ۱۰۹
۳-۱) مقدمه ۱۱۰
۳-۲) مراحل انجام محاسبات ۱۱۰
۳-۳) محاسبه انرژی پتانسیل مولکول فلوئور ۱۱۱
۳-۳-۱) روش محاسبات ۱۱۱
۳-۳-۲) تأثیر روش QCISD و CCSD بر مقادیر انرژی پتانسیل ۱۱۱
۳-۳-۳) تأثیر مجموعه پایه‌های مختلف بر انرژی پتانسیل ۱۱۳
۳-۴) محاسبه‌ی انرژی ترازهای چرخشی مولکول فلوئور ۱۱۴
۳-۴-۱) روش محاسبات ۱۱۴
۳-۴-۲) پارامترهای برنامه LEVEL ۱۱۵

۳-۴-۳) ترازهای چرخشی مولکول فلوئور ۱۲۰
۳-۵) تأثیر سطوح نظری متفاوت بر ترازهای چرخشی ۱۳۰
۳-۵-۱) اثر روش‌های QCISD و CCSD ۱۳۰
۳-۵-۲) اثر مجموعه پایه‌های مختلف بر ترازهای چرخشی ۱۳۱
۳-۶) بحث و نتیجه‌گیری ۱۳۲
منابع و مآخذ ۱۳۴

فهرست جداول

عنوان	صفحه
جدول (۱-۱) ویژگی‌های فلوئور	۴۵
جدول (۲-۱) برنامه نوشته شده به زبان MATLAB به منظور محاسبه توابع قدرت شعاعی	۶۱
جدول (۲-۲) مقدار قدم‌های R در فاصله‌های بین‌مولکولی مختلف	۶۴
جدول (۲-۳) مقادیر V_λ محاسبه شده با برنامه‌ی MATLAB	۶۵
جدول (۲-۴) برنامه نوشته شده در برنامه MATLAB برای محاسبه V_λ با قدم‌های ۰/۰۱ آنگستورومی	۶۸
جدول (۲-۵) مقادیر V_λ با قدم‌های ۰/۰۱ آنگستورومی برای انرژی پتانسیل برهم‌کنش اصلاح شده	۶۹
جدول (۲-۶) تابع نوشته شده در برنامه MATLAB برای محاسبه‌ی IPES	۷۱
جدول (۲-۷) مقادیر انرژی پتانسیل برهم‌کنش اصلاح‌شده و اصلاح‌نشده برای زاویه‌ی $\theta_2 = 0^\circ$ و مقادیر مربوط به برازش این داده‌ها	۷۵
جدول (۲-۸) مقادیر پارامترهای رابطه‌ی (۲-۳۳) برای IPES اصلاح‌نشده و اصلاح‌شده	۸۶
جدول (۲-۹) مقادیر عمق چاه پتانسیل D_e و قطر برخورد کره سخت σ، بر اساس پتانسیل تصحیح‌نشده و تصحیح‌شده به‌دست آمده از روش QCISD/aug-cc-pVTZ برای کمپلکس F_2-F_2 برای زاویه ϕ ثابت ۰ و ۹ درجه و برای پنج مقدار زاویه θ_2 برابر ۰، ۳۰، ۴۵، ۶ و ۹۰ درجه.	۸۷
جدول (۲-۱۰) مقادیر عمق چاه پتانسیل D_e و قطر برخورد کره سخت σ، بر اساس پتانسیل تصحیح‌نشده و تصحیح‌شده به‌دست آمده از روش QCISD/aug-cc-pVTZ برای کمپلکس F_2-F_2 برای زاویه θ_2 ثابت ۴۵ و ۹ درجه و برای پنج مقدار زاویه ϕ برابر ۰، ۳۰، ۴۵، ۶۰ و ۹۰ درجه	۸۷
جدول (۲-۱۱) مقادیر پارامترهای ثابت رابطه‌ی (۲-۳۵) به‌منظور برازش IPES دیمرهای F_2 و O_2	۹۴

جدول (۲-۱۲) مقادیر پارامترهای ثابت رابطه‌ی (۲-۳۶) به‌منظور برازش IPES دیمرهای F_2 و O_2 ۹۴

جدول (۲-۱۳) مقادیر پارامترهای ثابت رابطه‌ی (۲-۳۷) به‌منظور برازش IPES دیمرهای F_2و O_2 ۹۴

جدول (۲-۱۴) مقادیر پارامترهای ثابت رابطه‌ی (۲-۳۸) به‌منظور برازش IPES دیمرهای F_2 و O_2 ۹۵

جدول (۲-۱۵) مقادیر پارامترهای ثابت رابطه‌ی (۲-۳۹) به‌منظور برازش IPES دیمرهای F_2 و O_2 ۹۵

جدول (۲-۱۶) مقادیر پارامترهای ثابت رابطه‌ی (۲-۴۰) به‌منظور برازش IPES دیمرهای F_2 و O_2 ۹۵

جدول (۲-۱۷) مقادیر مجموع مربع خطای مطلق، R^2 و RMSE برای معادلات (۲-۳۵) تا (۲-۴۰) ۹۶

جدول (۲-۱۸) مقادیر پارامترهای ثابت رابطه (۲-۳۵) به‌منظور برازش داده‌های اصلاح‌شده و اصلاح‌نشده ی سطح چهار بعدی دیمر F_2 ۱۰۴

جدول (۳-۱) پارامترهای برنامه LEVEL ۱۱۵

جدول (۳-۲) پرونده ورودی برنامه‌ی LEVEL برای محاسبه انرژی ترازهای چرخشی مولکول فلوئور ۱۱۹

جدول (۳-۳) بخشی از خروجی کانال ۹ برنامه LEVEL ۱۲۰

جدول (۳-۴) ترازهای چرخشی مربوط به تراز ارتعاشی v=۰ ۱۲۱

جدول (۳-۵) ترازهای چرخشی مربوط به تراز ارتعاشی v=۱ ۱۲۲

جدول (۳-۶) ترازهای چرخشی مربوط به تراز ارتعاشی v=۲ ۱۲۳

جدول (۳-۷) ترازهای چرخشی مربوط به تراز ارتعاشی v=۳ ۱۲۴

جدول (۳-۸) ترازهای چرخشی مربوط به تراز ارتعاشی v=۴ ۱۲۵

جدول (۳-۹) ترازهای چرخشی مربوط به تراز ارتعاشی v=۵ ۱۲۶

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل (۱-۱) منحنی انرژی پتانسیل مدل کره‌ی سخت ۲۰

شکل (۱-۲) منحنی انرژی پتانسیل ساترلند ۲۱

شکل (۱-۳) منحنی انرژی پتانسیل مدل لنارد- جونز برای مولکول هیدروژن ۲۲

شکل (۱-۴) پتانسیل مورس و مدل نوسان‌گر هماهنگ ۲۵

شکل (۱-۵) محورهای اصلی لختی HCN ۳۶

شکل (۲-۱) نمایش هندسه‌ی عمومی سیستم F_2-F_2 ۵۲

شکل (۲-۲) انرژی پتانسیل برهم‌کنش بین‌مولکولی F_2-F_2 به‌صورت تابعی از فاصله‌ی بین‌مولکولی R ۵۴

شکل (۲-۳) انرژی پتانسیل برهم‌کنش بین‌مولکولی F_2-F_2 به‌صورت تابعی از زاویه‌ی θ_2 ۵۵

شکل (۲-۴) انرژی پتانسیل برهم‌کنش بین‌مولکولی F_2-F_2 به‌صورت تابعی از زاویه‌ی ϕ ۵۶

شکل (۲-۵) توابع قدرت شعاعی، V_λ، بسط لژاندر پتانسیل‌های برهم‌کنش بین‌مولکولی F_2-F_2 به عنوان تابعی از فاصله‌ی بین‌مولکولی R ۶۷

شکل (۲-۶) نمودار داده‌های IPES اصلاح‌نشده به‌دست‌آمده با روش از اساس و نتایج برازش آن‌ها به صورت تابعی از فاصله بین‌مولکولی برای زوایای θ_2 برابر با ۰ درجه و ۳۰ درجه ۷۶

شکل (۲-۷) نمودار داده‌های IPES اصلاح‌شده به‌دست‌آمده با روش از اساس و نتایج آن‌ها به صورت تابعی از فاصله بین‌مولکولی برای زوایای θ_2 برابر با ۰ درجه و ۳۰ درجه ۷۶

شکل (۲-۸) نمودار داده‌های IPES اصلاح‌نشده به دست آمده با روش از اساس و نتایج برازش آن‌ها به صورت تابعی از فاصله بین‌مولکولی برای زوایای θ_2 برابر با ۶۰ درجه و ۹۰ درجه ۷۷

شکل (۲-۹) نمودار داده‌های IPES اصلاح‌شده به دست آمده با روش از اساس و نتایج برازش آن‌ها به صورت تابعی از فاصله ی بین‌مولکولی برای زوایای θ_2 برابر با ۶۰ درجه و ۹۰ درجه. ۷۷

شکل (۲-۱۰) نمودار خطای مطلق برازش به صورت تابعی از فاصله‌ی بین‌مولکولی برای IPES اصلاح‌نشده مربوط به زوایای θ_2 برابر با ۰ درجه و ۳۰ درجه ۷۸

شکل (۲-۱۱) نمودار خطای مطلق برازش به‌صورت تابعی از فاصله‌ی بین‌مولکولی برای IPES اصلاح‌شده مربوط به زوایای θ_2 برابر با ۰ درجه و ۳۰ درجه ۷۹

شکل (۲-۱۲) نمودار خطای مطلق برازش به‌صورت تابعی از فاصله‌ی بین‌مولکولی برای IPES اصلاح‌نشده مربوط به زوایای θ_2 برابر با ۶۰ درجه و ۹۰ درجه ۷۹

شکل (۲-۱۳) نمودار خطای مطلق برازش به‌صورت تابعی از فاصله‌ی بین‌مولکولی برای IPES اصلاح‌شده. مربوط به زوایای θ_2 برابر با ۶۰ درجه و ۹۰ درجه ۷۹

شکل (۲-۱۴) نمودار درصد خطای نسبی برازش به‌صورت تابعی از فاصله‌ی بین‌مولکولی برای IPES اصلاح‌نشده مربوط به زوایای θ_2 برابر با ۰ درجه و ۳۰ درجه ۸۰

شکل (۲-۱۵) نمودار درصد خطای نسبی برازش به‌صورت تابعی از فاصله‌ی بین‌مولکولی برای IPES اصلاح‌شده مربوط به زوایای θ_2 برابر با ۰ درجه و ۳۰ درجه ۸۰

شکل (۲-۱۶) نمودار درصد خطای نسبی برازش به‌صورت تابعی از فاصله‌ی بین‌مولکولی برای IPES اصلاح‌نشده مربوط به زوایای θ_2 برابر با ۶۰ درجه و ۹۰ درجه ۸۱

شکل (۲-۱۷) نمودار درصد خطای نسبی برازش به‌صورت تابعی از فاصله‌ی بین‌مولکولی برای IPES اصلاح‌شده مربوط به زوایای θ_2 برابر با ۶۰ درجه و ۹۰ درجه ۸۱

شکل (۲-۱۸) تغییرات انرژی پتانسیل برهم‌کنش نسبت به تغییرات فاصله‌ی بین‌مولکولی برای موقعیتهای هندسی $\theta_2 = 30^\circ, \phi = 90^\circ$، $\theta_2 = 0^\circ, \phi = 0^\circ$، $\theta_2 = 45^\circ, \phi = 45^\circ$، $\theta_2 = 60^\circ, \phi = 0^\circ$، و $\theta_2 = 90^\circ, \phi = 90$ ۸۴

شکل (۲-۱۹) نمودار تغییرات V^* به‌صورت تابعی از R^* برای موقعیتهای هندسی $\theta_2 = 0^\circ, \phi = 0^\circ$، $\theta_2 = 30^\circ, \phi = 90^\circ$، $\theta_2 = 45^\circ, \phi = 45^\circ$، $\theta_2 = 60^\circ, \phi = 0^\circ$ و $\theta_2 = 90^\circ, \phi = 90$ ۸۵

شکل (۲-۲۰) مقایسه نتایج برازش با استفاده از رابطه (۲-۳۳) با مقادیر IPES بدون بعد برای موقعیت $\theta_2 = 0^\circ, \phi = 0^\circ$. ۸۸

شکل (۲-۲۱) مقایسه برازش با استفاده از رابطه (۲-۳۳) با مقادیر IPES بدون بعد برای موقعیت $\theta_2 = 30^\circ, \phi = 90^\circ$ ۸۹

شکل (۲-۲۲) مقایسه برازش با استفاده از رابطه (۲-۳۳) با مقادیر IPES بدون بعد برای موقعیت $\theta_2 = 45^\circ, \phi = 45^\circ$ ۸۹

شکل (۲-۲۳) نمودار خطای مطلق برازش مقادیر IPES بدون بعد با استفاده از رابطه (۲-۳۳) برای موقعیت $\theta_2 = 0^\circ, \phi = 0^\circ$ ۹۰

شکل (۲-۲۴) نمودار خطای مطلق برازش مقادیر IPES بدون بعد با استفادهاز رابطه (۲-۳۳) برای موقعیت $\theta_2 = 30^\circ, \phi = 90^\circ$ ۹۰

شکل (۲-۲۵) نمودار خطای مطلق برازش مقادیر IPES بدون بعد با استفاده از رابطه (۲-۳۳) برای موقعیت $\theta_2 = 45^\circ, \phi = 45^\circ$ ۹۱

شکل (۲-۲۶) ارزیابی معادله (۲-۳۵) برای برازش V^* دیمر F_2 ۹۸

شکل (۲-۲۷) ارزیابی معادله (۲-۳۵) برای برازش V^* دیمر O_2 ۹۸

شکل (۲-۲۸) ارزیابی معادله (۲-۳۶) برای برازش V^* دیمر F_2 ۹۹

شکل (۲-۲۹) ارزیابی معادله (۲-۳۶) برای برازش V^* دیمر O_2 ۹۹

شکل (۲-۳۰) ارزیابی معادله (۲-۳۷) برای برازش V^* دیمر F_2 ۱۰۰

شکل (۲-۳۱) ارزیابی معادله (۲-۳۷) برای برازش V^* دیمر O_2 ۱۰۰

شکل (۲-۳۲) ارزیابی معادله (۲-۳۸) برای برازش V^* دیمر F_2 ۱۰۱

شکل (۲-۳۳) ارزیابی معادله (۲-۳۸) برای برازش V^* دیمر O_2 ۱۰۱

شکل (۲-۳۴) ارزیابی معادله (۲-۳۹) برای برازش V^* دیمر F_2 ۱۰۲

شکل (۲-۳۵) ارزیابی معادله (۲-۳۹) برای برازش V^* دیمر O_2 ۱۰۲