

الحمد لله الذي  
خلقنا من فضله  
والحمد لله الذي  
تربانا على الهدى  
والحمد لله الذي  
جعلنا من عباده  
المتقين

الشيخ  
عبد الرحمن  
بن عبد الوهاب  
أبو حامد



دانشگاه یزد

دانشکده علوم

گروه شیمی

## پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی اثر گونه‌ی سوم و محاسبه ضریب دوم ویریل گاز  $F_2$  با استفاده از سطح

نظری QCISD(T)/aug-cc-pVTZ

استاد راهنما:

دکتر محمدرضا نوربالا

استاد مشاور:

دکتر منصور نمازیان

پژوهش و نگارش:

نجمه محمودآبادی

شهریور ماه ۹۰



## تقدیم:

خدای را بسی شاکرم که از روی کرم، پدر و مادری مهربان و فداکار  
نصیحت تا در سایه‌ی درخت پر بار و جودشان بیایم و از ریشه‌ی  
آن شاخ و برگ کیرم.

حال از روی سپاس و قدر دانی این پژوهش را تقدیم می‌کنم به

مهربانی‌های پدر و مادر عزیزم

که وجودشان دلیلی بر بودنم و نامشان تاج افتخاری است بر سرم



## شکر و قدردانی

از سعی تو ای دل چه کشاید که در این راه بی رهبر توفیق، همانا توان رفت

بی یاری دولت نتوان شده ره عشق کاین بادیه را بی است که تنها نتوان رفت

شکر و سپاس بی کران پروردگار یکتا را که، مستی مان بخشید و خوشه چینی از طریق علم و معرفت را روزیمان ساخت. اکنون که به یاری و الطاف ایزدمنان، گامی اندک در راه تحصیل دانش و معرفت برداشته شد و

این پایان نامه به اتمام آمد؛

شایسته می دانم از استاد بزرگوارم جناب آقای دکتر محمد رضا نوربالا که راهنمایی های ایشان در طول تحقیق هم چون فانوسی بوده است، که کشتی های سرگردان را به ساحل نجات می رساند، شکر و قدردانی نمایم.

از استاد که انقدر جناب آقای دکتر منصور نمازیان، که جهت مشاوره و هدایت این پایان نامه دقت و عنایت خود را در این نغمه نمودند کمال سپاسگذاری را دارم.

و از اساتید که انقدر: جناب آقای دکتر محمد کالوند و آقای دکتر حسین محمدی نش که مطالعه و داوری این

پایان نامه را تقبل نمودند، شکر می نمایم

؛ همچنین از تمامی دوستان خوبم که خاطرات دوران تحصیل با حضور شیرینشان رقم خورده است،

سپاسگذارم و برایشان آرزوی موفقیت دارم.





## چکیده

در این تحقیق برای ارزیابی سطح انرژی پتانسیل بین مولکولی (IPS) سیستم  $F_2-F_2$  به محاسبه‌ی ضریب دوم ویریال گاز فلوئور پراخته شد. IPSها با استفاده از سطح نظری QCISD(T) و مجموعه پایه‌ی aug-cc-pVTZ به دست آمده‌اند. محاسبات در فاصله‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلوین با استفاده از پتانسیل‌های تصحیح‌نشده و تصحیح‌شده با روش تصحیح از بالا به پایین (CP) انجام شد. علاوه بر این تأثیر فاکتور بولتزمن بر ضریب دوم ویریال نیز بررسی شد و مشاهده گردید که مقادیر به دست آمده با در نظر گرفتن این فاکتور بل مقادیر تجربی تفاوت کمتری دارد. اثر جسم سوم بر پتانسیل بین مولکولی یا به عبارت دیگر اعتبار و یا عدم اعتبار جمع پذیری جفت‌گویی پتانسیل‌ها در سیستم  $F_2-F_2$  نیز مورد مطالعه قرار گرفت. بدین منظور منومر سوم فلوئور در سه جهت اصلی  $X, Y, Z$  و جهت‌های بین محوری  $XY, XZ, YZ$  به مرکز سیستم  $F_2-F_2$  نزدیک شد. از سطح نظری QCISD(T) به عنوان بالاترین سطح نظری محاسبات استفاده شد. تمام محاسبات با استفاده از Gaussian09 و در محیط Linux انجام گرفت. مشاهده شد که در فاصله ۶ آنگسترمی از مرکز سیستم  $F_2-F_2$  اثر گونه‌ی سوم قابل چشم‌پوشی است.



.....۱.....	فصل اول: مروری بر روش‌های محاسباتی نظری
.....۲.....	(۱-۱) مقدمه
.....۳.....	(۲-۱) روش‌های شرمی محاسباتی
.....۳.....	(۱-۲-۱) روش‌های مکاریک مولکولی
.....۵.....	(۲-۲-۱) روش‌های مکانیک کوانتومی
.....۵.....	(۱-۲-۲-۱) روش‌های از اساس
.....۹.....	(۱-۱-۲-۲-۱) تقریب بورن-اپنهایمر
.....۱۰.....	(۳-۲-۱) روش‌های گوسین
.....۱۲.....	(۴-۲-۱) روش‌های وردشی
.....۱۲.....	(۱-۴-۲-۱) سیستم‌های پوسته باز و بسته
.....۱۳.....	(۳-۱) نظری هارتری-فاک
.....۱۵.....	(۱-۳-۱) معادله‌ی شرودینگر
.....۱۶.....	(۴-۱) مجموعه‌ی پایه
.....۲۰.....	(۱-۴-۱) مجموعه‌های پایه حداقل
.....۲.۱.....	(۲-۴-۱) مجموعه‌های پایه ظرفیتی شکافته
.....۲.۱.....	(۳-۴-۱) مجموعه‌های پایه قطبیده
.....۲.۲.....	(۴-۴-۱) مجموعه‌های همبستگی-سازگار
.....۲.۲.....	(۶-۴-۱) خطای قطع مجموعه‌ی پای
.....۲.۳.....	(۷-۴-۱) خطای برهم‌نهی مجموعه‌ی پای
.....۲.۴.....	(۵-۱) همبستگی الکترونی
.....۲.۵.....	(۱-۵-۱) روش برهم‌کنش پیکربندی
.....۲.۵.....	(۱-۱-۵-۱) روش برهم‌کنش پیکربندی کامل

.....۲.۶	۲-۱-۵-۱) روش برهم‌کنش پیکربندی با برانگیختگی یگانه (CIS)
.....۲.۶	۳-۱-۵-۱) روش برهم‌کنش پیکربندی با برانگیختگی یگانه و دوگانه (CISD)
.....۲.۷	۴-۱-۵-۱) روش برهم‌کنش پیکربندی مربعی
.....۲.۷	۵-۱-۵-۱) روش برهم‌کنش پیکربندی درجه ۲، با جایگزینی یگانه و دوگانه (QCISD) ۲۷
.....۲.۸	۲-۵-۱) روش خوشه‌های جفت‌شده
.....۲.۸	۶-۱) نظریه اختلال مولر-پلست
.....۳.۰	۷-۱) ساختار برنامه
.....۳.۱	۸-۱) نظریه‌ی تابعیت چگالی
.....۳.۳	۹-۱) پتانسیل‌های عین مولکولی
.....۳.۴	۱-۹-۱) پتانسیل برهم‌کنش برد بلند
.....۳.۵	۲-۹-۱) پتانسیل برهم‌کنش برد کوتاه
.....۳.۵	۱۰-۱) ضریب دوم ویریال
.....۳.۷	۱-۱۰-۱) منشاء معادله‌ی حالت ویریال
.....۴.۲	۳-۱۰-۱) بررسی معادله‌ی حالت ویریال از طریق مکانیک آماری
.....۴.۵	۴-۱۰-۱) توصیف کلاسیکی ضریب دوم ویریال
.....۴.۸	۱۱-۱) برهم‌کنش‌های چندذره‌ای و اثر گونه‌ی سوم
.....۵.۴	۱۲-۱) دانستری‌هایی درباره فلوئور
.....۵.۵	۱-۱۲-۱) تاریخچه‌ی فلوئور
.....۵.۵	۲-۱۲-۱) کاربردهای فلوئور
.....۶.۵	۳-۱۲-۱) خواص فیزیکی فلوئور
.....۵.۸	۴-۱۲-۱) خواص شیمیایی فلوئور
.....۵.۸	۵-۱۲-۱) ترکیبات فلوئور
.....۵.۸	۶-۱۲-۱) تأثیر فلوئور بر انسان، تغذیه و سلامتی
.....۶.۰	۷-۱۲-۱) نحوه‌ی عمل فلوئور در بدن

.....۶۱.....	۸-۱۲-۱) منابع غذایی فلوتور
.....۶۲.....	۹-۱۲-۱) اثرات فلوتور بر محیط زیست
<b>فصل دوم: محاسبه ضریب دوم ویریا ل گاز فلوتور با استفاده از روش QCISD(T)/Aug-</b>	
.....۶۳.....	<b>cc-pVTZ</b>
.....۶۴.....	۱-۲) مقدمه
.....۶۶.....	۲-۲) تاریخچه‌ی محاسباتی ضریب دوم وی‌تی
.....۷۵.....	۳-۲) شوهه‌ی محاسباتی ضریب دوم وی‌تی برای مولکول گازی $F_2$
.....۹۶.....	۴-۲) نتیجه‌گیری
<b>فصل سوم: بررسی اثر گونه‌ی سوم سیستم <math>F_2-F_2</math> با مجموعه پایه aug-cc-pVTZ در سطح نظری</b>	
.....۹۹.....	<b>QCISD(T)</b>
.....۱۰۰.....	۱-۳) مقدمه
.....۱۰۲.....	۲-۳) تاریخچه
.....۱۰۳.....	۳-۳) بررسی اثر گونه‌ی سوم بر پتانسیل عین مولکولی سیستم $F_2-F_2$
.....۱۲۹.....	۴-۳) نتیجه‌گیری
.....۱۳۱.....	مراجع

## فهرست جدول‌ها

صفحه	عنوان
.....۵۷.....	جدول (۱-۱) خواص فیزیکی ف لوئور
.....۸.....	جدول (۱-۲) ضریب دوم وی‌گیل مولکول $F_2$ با پتانسرگی تصحیح‌شده و تصحیح‌نشده در دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلونی
.....۸۱.....	جدول (۲-۲) بررسی اثر وزن آماری بر مقادیر ضریب دوم وی‌گیل مولکول $F_2$ با پتانسرگی‌های تصحیح‌شده در دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلونی
.....۸۲.....	جدول (۳-۲) ضریب دوم وی‌گیل مولکول $F_2$ با استفاده از پتانسرگی تصحیح‌شده و تصحیح‌نشده در دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلونی برای $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $45^\circ$ و $90^\circ$
.....۸۳.....	جدول (۴-۲) ضریب دوم وی‌گیل مولکول $F_2$ با استفاده از پتانسرگی تصحیح‌شده در دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلونی و $\phi=0^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$
.....۸۴.....	جدول (۵-۲) ضریب دوم وی‌گیل مولکول $F_2$ با استفاده از پتانسرگی تصحیح‌نشده در دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلونی و $\phi=0^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$
.....۸۵.....	جدول (۶-۲) ضریب دوم وی‌گیل مولکول $F_2$ با استفاده از پتانسرگی تصحیح‌شده در دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلونی و $\phi=45^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$
.....۸۶.....	جدول (۷-۲) ضریب دوم وی‌گیل مولکول $F_2$ با استفاده از پتانسرگی تصحیح‌نشده در دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلونی و $\phi=45^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$
.....۸۷.....	جدول (۸-۲) ضریب دوم وی‌گیل مولکول $F_2$ با استفاده از پتانسرگی تصحیح‌شده در دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلونی و $\phi=60^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$
.....۸۸.....	جدول (۹-۲) ضریب دوم وی‌گیل مولکول $F_2$ با استفاده از پتانسرگی تصحیح‌نشده در دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلونی و $\phi=60^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$
.....۸۹.....	جدول (۱۰-۲) ضریب دوم وی‌گیل مولکول $F_2$ با استفاده از پتانسرگی تصحیح‌شده در دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلونی و $\phi=90^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$

جدول (۱۱-۲) ضریب دوم وی طلی مولکول  $F_2$  با استفاده از پتانسیل تصحیح نشده در دامنه‌ی

دمایی ۱۰۰ تا ۶۰۰ کلوی و  $\phi=90^\circ$  و  $\theta_2$  برابر  $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$  و  $90^\circ$  .....۹.۰

جدول (۱۲-۲): ضریب دوم ویریا مولکول  $F_2$  با پتانسیل‌های تصحیح نشده و تصحیح شده در

دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۳۵۰ کلوی .....۹.۱

جدول (۱۳-۲): تأثیر فاکتور بولتزمن بر داده‌های ضریب دوم ویریا با استفاده از پتانسیل‌های

تصحیح شده .....۹.۲

جدول (۱۴-۲): ضریب دوم ویریا با استفاده از پتانسیل‌های تصحیح نشده و تصحیح شده برای

زاویه‌ی  $\theta_2$  برابر  $0^\circ, 45^\circ$  و  $90^\circ$  .....۹.۳

جدول (۱۵-۲): داده‌های ضریب دوم ویریا مولکول  $F_2$  با مجموعه پایه  $6-31G^*$  با استفاده

از پتانسیل‌های تصحیح شده و تصحیح نشده در دامنه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۳۵۰ کلوی. ۹۴.

جدول (۱۶-۲): داده‌های ضریب دوم ویریا مولکول  $F_2$  با مجموعه پایه‌ی  $6-31G^*$  با استفاده

از پتانسیل‌های تصحیح شده برای زاویه‌ی  $\theta_2$  برابر  $0^\circ, 45^\circ$  و  $90^\circ$  در دامنه‌ی دمایی

۱۰۰ تا ۳۵۰ کلوی. .....۹.۵

جدول (۱-۳) آرایه‌ی Z مربوط به به‌ئنه کردن سرپستم  $F_2-F_2$  .....۱.۱۵

جدول (۲-۳) خلاصه‌ای از کارهای تحقیقاتی انجام شده روی اثر جسم سوم سرپستم  $F_2-F_2$ . ۱.۲.۹

## فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل (۱-۲) نمایش هندسه‌ی عمومی سیستم $F_2-F_2$ مطالعه‌شده در این تحقیق	۷۶....
شکل (۲-۲) ضریب دوم وی‌تلی گاز فلوتور بر حسب دما با استفاده از پتانسیل تصحیح‌شده و پتانسیل تصحیح‌نشده	۸۰.....
شکل (۳-۲) ضریب دوم وی‌تلی گاز فلوتور بر حسب دما با در نظر گرفتن وزن آماری و بدون در نظر گرفتن وزن آماری	۸۱.....
شکل (۴-۲) ضریب دوم وی‌تلی با استفاده از پتانسیل تصحیح‌شده و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $45^\circ$ و $90^\circ$	۸۲.....
شکل (۵-۲) ضریب دوم وی‌تلی گاز فلوتور بر حسب دما با استفاده از پتانسیل تصحیح‌شده برای زاویه‌ی $\phi$ مساوی $30^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$	۸۳.....
شکل (۶-۲) ضریب دوم وی‌تلی گاز فلوتور بر حسب دما با استفاده از پتانسیل تصحیح‌نشده برای زاویه‌ی $\phi$ مساوی $30^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$	۸۴.....
شکل (۷-۲) ضریب دوم وی‌تلی گاز فلوتور بر حسب دما با پتانسیل تصحیح‌شده برای زاویه‌ی $\phi$ مساوی $45^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$	۸۵.....
شکل (۸-۲) ضریب دوم وی‌تلی گاز فلوتور بر حسب دما با استفاده از پتانسیل تصحیح‌نشده برای زاویه‌ی $\phi$ مساوی $45^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$	۸۶.....
شکل (۹-۲) ضریب دوم وی‌تلی گاز فلوتور بر حسب دما با استفاده از پتانسیل تصحیح‌شده برای زاویه‌ی $\phi$ مساوی $60^\circ$ و $\theta_2$ برابر $0^\circ$ ، $30^\circ$ ، $45^\circ$ و $60^\circ$ و $90^\circ$	۸۷.....



شکل (۲-۱۰) ضریب دوم وی طلی گاز فلوئور بر حسب دما با استفاده از پتانسرلی  
تصحیح نشده برای زاوی  $\phi$  مساوی  $60^\circ$  و  $\theta_2$  برابر  $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$  و

.....۸۸..... $90^\circ$

شکل (۲-۱۱) ضریب دوم وی طلی گاز فلوئور بر حسب دما با استفاده از پتانسرلی  
تصحیح شده برای زاوی  $\phi$  مساوی  $90^\circ$  و  $\theta_2$  برابر  $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ ،

.....۸۹..... $60^\circ$  و  $90^\circ$

شکل (۲-۱۲) ضریب دوم وی طلی گاز فلوئور بر حسب دما با استفاده از پتانسرلی  
تصحیح نشده برای زاوی  $\phi$  مساوی  $90^\circ$  و  $\theta_2$  برابر  $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$  و

.....۹۰..... $90^\circ$

شکل (۲-۱۳) ضریب دوم ویریال گاز فلوئور به عنوان تابعی از دما با استفاده از

.....۹۱..... پتانسیل های تصحیح شده و تصحیح نشده. در سطح نظری MP2

شکل (۲-۱۴) ضریب دوم ویریال گاز فلوئور به عنوان تابعی از دما با در نظر گرفتن

.....۹۲..... وزن آماری و بدون وزن آماری بولتزمن در سطح نظری MP2

شکل (۲-۱۵) ضریب دوم ویریال گاز فلوئور به عنوان تابعی از دما برای زاویه  $\theta_2$   
برابر  $0^\circ, 45^\circ$  و  $90^\circ$  و ضریب دوم ویریال کلی تصحیح شده. در سطح

.....۹۳..... نظری MP2

شکل (۲-۱۶) ضریب دوم ویریال گاز فلوئور با مجموعه پایه  $6-31G^*$  با استفاده از

.....۹۴..... پتانسیل تصحیح نشده به عنوان تابعی از دما.

شکل (۲-۱۷) ضریب دوم ویریال گاز فلوئور به عنوان تابعی از دما با مجموعه پایه

$6-31G^*$  با استفاده از پتانسیل تصحیح شده برای زاویه  $\theta_2$  برابر  $0^\circ$ ،

.....۹۵.....  $45^\circ$  و  $90^\circ$  و ضریب دوم ویریال کلی تصحیح شده

شکل (۳-۱) هندسه ی مورد استفاده در بررسی اثر گونه ی سوم برای نزدیک شدن

.....۱.۱۶..... منومر  $F_2$  سوم در صفحه ی xy

شکل (۲-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم در جهات  $x$ ،  $y$  و  $z$  برای نزدیک

.....۱.۱.۸

شدن منومر سوم به سیستم  $F_2-F_2$  بر حسب فاصله

شکل (۳-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم در جهت  $X$  برای نزدیک شدن

.....۱.۱.۹

منومر سوم به سیستم  $F_2-F_2$  بر حسب فاصله

شکل (۴-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم در جهت  $Y$  برای نزدیک شدن

.....۱.۲.۰

منومر سوم به سیستم  $F_2-F_2$  بر حسب فاصله

شکل (۵-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم در جهت  $Z$  برای نزدیک شدن

.....۱.۲.۰

منومر سوم به سیستم  $F_2-F_2$  بر حسب فاصله

شکل (۶-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم در جهت  $XY$  برای نزدیک شدن

.....۱.۲.۱

منومر سوم به سیستم  $F_2-F_2$  بر حسب فاصله

شکل (۷-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم در جهت  $YZ$  برای نزدیک شدن

.....۱.۲.۱

منومر سوم به سیستم  $F_2-F_2$  بر حسب فاصله

شکل (۸-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم در جهت  $XZ$  برای نزدیک شدن

.....۱.۲.۲

منومر سوم به سیستم  $F_2-F_2$  بر حسب فاصله

شکل (۹-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۲

روی محور  $x$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

شکل (۱۰-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۳

روی محور  $y$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

شکل (۱۱-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۴

روی محور  $z$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

شکل (۱۲-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۴

روی محور  $xy$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

شکل (۱۳-۳) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۵

روی محور  $xz$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

شکل (۳-۱۴) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۵ روی محور  $yz$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

شکل (۳-۱۵) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۶ روی محور  $x$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

شکل (۳-۱۶) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۶ روی محور  $y$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

شکل (۳-۱۷) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۷ روی محور  $z$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

شکل (۳-۱۸) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۷ روی محور  $xy$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

شکل (۳-۱۹) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۸ روی محور  $xz$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

شکل (۳-۲۰) انرژی مربوط به اثر گونه‌ی سوم برای نزدیک شدن منومر  $F_2$  سوم بر

.....۱.۲.۸ روی محور  $yz$  به سیستم  $F_2-F_2$  به‌عنوان تابعی از  $R_{TB}$

