

مطالعه سطح انرژی پتانسیل بین مولکولی برای کربن دواتمی و گاز نئون

محمد مهدی دهشیری^۱، محمدرضا نوربالا^{۲*}، منصور نمازیان^۳

مشخصات نویسنده اول

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه یزد dehshiri76@gmail.com

مشخصات نویسنده دوم

۲- نویسنده مسئول: دانشیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه یزد noorbala@yazd.ac.ir

مشخصات نویسنده سوم

۳- استاد، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه یزد namazian@yazd.ac.ir

واژگان کلیدی: سطح انرژی پتانسیل بین مولکولی، کربن دواتمی، نئون، خطای برهمه‌نی مجموعه پایه

مقدمه

تاکنون گونه‌های شیمیایی بسیاری در محیط‌های میان‌ستاره‌ای شناسایی شده‌اند. با کشف مولکول‌های بیشتر، درک ما از شیمی این مولکول‌ها، به‌ویژه آن‌هایی که فراتر از مرزهای شیمی متعارف هستند، گسترش می‌یابد. یکی از این مولکول‌ها در اخترشیمی، مولکول دواتمی کربن (C_2) است. نخستین بار، این مولکول در سال ۱۹۷۷ توسط سوزا و لوتز از طریق مشاهده خطوط جذبی شناسایی شد (Souza & LUTz, 1977). پس از آن، حضورش به فراوانی در محیط‌های خارج از زمین، مانند دنباله‌دارها، جوهای ستاره‌ای و ابرهای میان‌ستاره‌ای گزارش شده و مطالعات متعددی بر روی آن انجام گرفته است (Hamano et al., 2019). بررسی سطح انرژی پتانسیل (PES) مولکول‌ها بسیار حائز اهمیت است زیرا این سطوح بیانگر تغییرات انرژی ناشی از نزدیک شدن و برهم‌کنش بین مولکول‌ها هستند. تحلیل این سطوح به فهم بهتر نیروهای بین‌مولکولی کمک می‌کند و می‌تواند باعث پیشرفت‌های مهمی در زمینه‌های فیزیکی و شیمیایی شود. سطوح انرژی پتانسیل نقش کلیدی در محاسبات مکانیک کوانتومی و کلاسیکی ایفا می‌کنند (Gunnar & Hua-Gen, 2000; Najar et al., 2008).

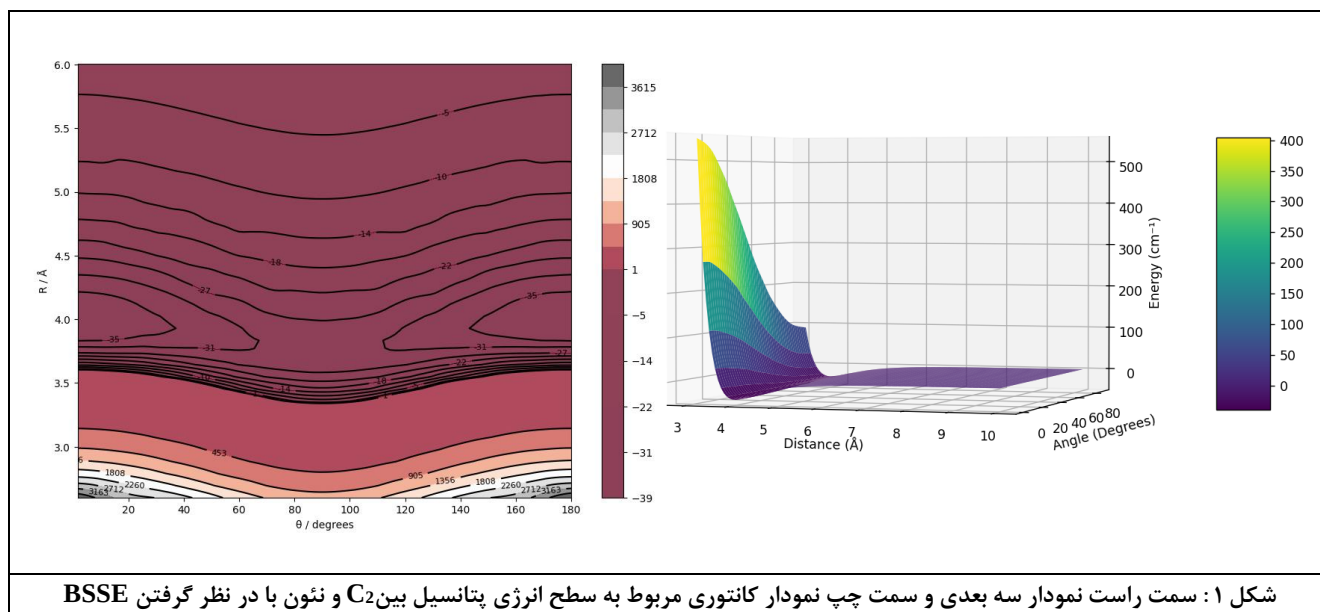
روش پژوهش

در سال ۱۹۹۷، ناومکین و مک‌کورت به بررسی سطح انرژی پتانسیل بین گاز نجیب آرگون و C_2 پرداختند. آنها از مجموعه پایه aug-cc-pVTZ استفاده کردند. نتایج به دست آمده با مدل لنارد-جونز مقایسه شد و مشخص شد به‌خوبی با داده‌ها مطابقت ندارد. آن‌ها پیش‌بینی کردند که پتانسیل برهم‌کنش دارای یک چاه تقریباً کروی است که عمیق‌ترین نقطه آن در نزدیکی دو انتهای مولکول C_2 قرار دارد (Naumkin & McCourt, 1997). در این پژوهش اسکن و محاسبه انرژی سامانه شامل گاز نئون و مولکول کربن دواتمی با استفاده از روش $ccsd(t)$ و مجموعه پایه aug-cc-pVTZ و همچنین با

در نظر گرفتن خطای برهم‌نهی مجموعه پایه (BSSE) صورت گرفته است. اسکن فاصله بین مرکز جرم مولکول C_2 و گاز نئون برای فاصله‌های ۲ تا ۴ آنگسترم با قدم‌های ۰/۱ آنگسترمی و برای فاصله‌های ۴ تا ۶ آنگسترم با قدم‌های ۰/۲ آنگسترمی و برای فاصله‌های ۶ تا ۱۰ آنگستروم با قدم‌های ۰/۵ آنگسترمی صورت گرفت. همچنین با توجه به تقارن سامانه، محاسبات برای زوایای ۰ تا ۹۰ درجه با قدم‌های ۱۰ درجه‌ای انجام شده است. سپس داده‌های موجود در خروجی برنامه گوسین ۱۶ با استفاده از اکسل، زبان برنامه نویسی پایتون و کتابخانه‌های نام‌پای، پانداس و متپلات استخراج شده و مورد تحلیل و بررسی قرار گرفته است.

بحث و نتیجه گیری

نتایج محاسبات با در نظر گرفتن BSSE نشان می‌دهد که برهمکنش مولکول‌های C_2 به نسبت ضعیف بوده و بیشترین برهمکنش برای زوایای صفر و ۱۸۰ درجه و برابر با $-۳۹/۳ \text{ cm}^{-1}$ است و ضعیف‌ترین برهمکنش مربوط به زاویه ۹۰ درجه و $-۲۹/۸ \text{ cm}^{-1}$ است. لازم به ذکر است بدون در نظر گرفتن BSSE برای زاویه صفر و ۱۸۰ درجه مقدار انرژی برهمکنش اصلاح‌نشده $-۸۱/۲ \text{ cm}^{-1}$ و برای زاویه ۹۰ درجه $-۵۶/۵ \text{ cm}^{-1}$ به دست آمده است که بیانگر مهم بودن سهم BSSE است.



منابع و مراجع

- [1] Gunnar, N., & Hua-Gen, Y. (2000). Quantum theory of bimolecular chemical reactions. *Reports on Progress in Physics*, 63(7), 1001. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/63/7/201>
- [2] Hamano, S., Kawakita, H., Kobayashi, N., Takenaka, K., Ikeda, Y., Matsunaga, N., Kondo, S., Sameshima, H., Fukue, K., & Yasui, C. (2019). First detection of A-X (0, 0) bands of interstellar C_2 and CN. *The Astrophysical Journal*, 881(2), 143.
- [3] Najar, F., Abdallah, D. B., Jaidane, N., & Lakhdar, Z. B. (2008). Potential energy surface for the $C_2(X^1\Sigma_g^+) + He(1S)$ system: Application to the rotationally inelastic scattering of C_2 in collisions with He. *Chemical physics letters*, 460(1-3), 31-36.
- [4] Naumkin, F. Y., & McCourt, F. (1997). A nontypical atom-diatom van der Waals interaction: Ar- C_2 . *The Journal of Chemical Physics*, 107(4), 1185-1194.
- [5] Souza, S. P., & LUTz, B. L. (1977). Detection of C_2 in the interstellar spectrum of Cygnus OB2 number 12/VI Cygni number 12. *Astrophysical Journal, Part 2-Letters to the Editor*, vol. 216, Aug. 15, 1977, p. L49-L51., 216, L49-L51.