



تجزیه و تحلیل مختصات نرمال طیف ارتعاشی و سد پتانسیل چرخشی گروه های متیل و تری فلورو متیل ۱،۱،۱-تری فلورو استون

محبوبه غلامحسین پور^۱، سید فرامرز طیاری^{۲*}، سعید رضا امامیان^۱

^۱دانشگاه آزاد اسلامی، واحد شاهرود، دانشکده علوم پایه، گروه شیمی، شاهرود، ایران

^۲مشهد- دانشگاه فردوسی - دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۹۲/۱۱/۷، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۹۳/۱/۲۰، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۹۳/۲/۱

چکیده

در این پژوهش طیف ارتعاشی و سد انرژی برای چرخش داخلی گروه های متیل و تری فلورو متیل مولکول ۱،۱،۱-تری فلورو استون با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی شده است. محاسبات فرکانس در سطح B3LYP/6-311++G(3df,3pd) انجام گرفت و فرکانسهای محاسبه شده با استفاده از ضریب مقیاسی به مقادیر تجربی بسیار نزدیک شده اند. سپس با استفاده از شدت نوارهای مادون قرمز و فعالیت نوارهای رامان محاسبه شده این ارتعاشات، طیف های ارتعاشی شبیه سازی، مورد بررسی و تجزیه و تحلیل قرار گرفتند. برای محاسبه انرژی چرخشی گروه های متیل و تری فلورو متیل از سطوح محاسباتی MP2 و B3LYP با توابع پایه مختلف استفاده شده است. علاوه بر این، با استفاده از مختصات جابه جایی اتم ها که از خروجی گوسین محاسبه شده است، مختصات تقارنی محاسبه و با استفاده از آن مختصات نرمال فرکانسهای ارتعاشی بنیادی مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. با استفاده از مختصات تقارنی هنجار شده توزیع انرژی پتانسیل برای هر فرکانس بنیادی نیز محاسبه گردید.

واژه های کلیدی: ۱،۱،۱-تری فلورو استون، طیف ارتعاشی، نظریه تابعی چگالی، سد انرژی چرخش، تجزیه و تحلیل مختصات طبیعی، مختصات تقارنی.

۱. مقدمه

تری فلورو استون فعالیتهای از خود نشان می دهد که در استون و دیگر کتونهای مشابه دیده نمی شود. علاوه بر اثرات فیزیکی که این گروه ایجاد می کند، تری فلورو خاصیت الکترون دوستی گروه کربونیل را نیز افزایش می دهد. این ترکیب در محیط های آبی هیدراته شده و تعادل عمدتاً به سمت gem-diol پیش می رود [۱] که در مجاورت یک ترکیب قلیایی تری مر می گردد [۲]. طیف های ارتعاشی مادون قرمز و رامان این ترکیب در فاز های گازی مایع، و جامد توسط Church و Durig مورد بررسی قرار گرفته است [۳]. Church و Durig شیوه پیچشی گروه

*عهده دار مکاتبات: سید فرامرز طیاری

نشانی: مشهد - دانشگاه فردوسی - دانشکده علوم - گروه شیمی

تلفن: ۰۹۱۵۳۱۰۳۵۳۸ پست الکترونیک: E-mail: sftayyari@hotmail.com

متیل در این ترکیب را به صورت نواری پهن و قوی در 40 cm^{-1} مشاهده کردند [۳]. این محققین با استفاده از این نتیجه و نتایج حاصل از پراش الکترونی [۴] یک سد پتانسیل مرتبه سوم به ارتفاع 320 cm^{-1} را محاسبه کردند. با این وصف Durig و همکاران در مطالعات بعدی ارتفاع این سد را به مقدار کمتری برابر $295 \pm 1 \text{ cm}^{-1}$ تخمین زدند [۵]. این محققین سد انرژی پتانسیل چرخشی برای گروه CF_3 بسیار نزدیک به سد چرخش برای گروه CH_3 در استون برابر دانستند که مقدار آن را برابر 291 cm^{-1} تخمین زدند [۶]. ولی این مقدار بسیار کمتر از ارتفاع سد چرخش گروه CH_3 در تری فلورو استون است که توسط این محققین مقداری برابر $392 \pm 14 \text{ cm}^{-1}$ تخمین زده شده است [۴]. هدف از این پژوهش بررسی مجدد طیف های ارتعاشی تری فلورو استون با کمک سطوح پیشرفته نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از تجزیه و تحلیل مختصات نرمال ارتعاشات مولکولی است. در این پژوهش همچنین کوشش می شود تناقضات مشاهده شده در نتایج به دست آمده برای بررسی سد انرژی پتانسیل در مقابل چرخش گروه های متیل و تری فلورو متیل بررسی و در صورت امکان تصحیح گردد.

۲. محاسبات

همه محاسبات با نرم افزار گوسین ۰۹ [۷] انجام شده است. فرکانس های ارتعاشی در سطح محاسباتی B3LYP [۸،۹] با استفاده از تابع پایه 6-311++G(3df,3pd) محاسبه شده اند. به منظور در نظر گرفتن ناهماهنگی در توابع پتانسیل حرکت های ارتعاشی فرکانسهای ارتعاشی ناهماهنگ نیز در همان سطح محاسباتی B3LYP/6-311++(G3df,3pd) با استفاده از تکنیک "anharmonic" [۱۰-۱۲] نیز محاسبه شده است. برای رسم نمودارها از معادله لورنسی با نیم پهنا در نیم ارتفاع برابر 3 cm^{-1} و از نرم افزار EXCEL استفاده شده است. برای محاسبه سد پتانسیل برای چرخش گروه های CH_3 و CF_3 از سطوح محاسباتی MP2 [۱۳] و B3LYP با توابع پایه مختلف استفاده شده است. به منظور محاسبه سد چرخش گروه های متیل و تری فلورو متیل، تقارن محلی C_{3v} برای این گروه ها در نظر گرفته شده است و دوران حول محور C-C با تغییر زاویه دو وجهی H-C-O و C-C-O در هر مرحله به اندازه 10° و ثابت نگه داشتن بقیه پارامترهای ساختاری در حد تعادلی، انرژی با روش SCAN محاسبه شده است.

با استفاده از خروجی گوسین میزان جابه جایی هر اتم در هر یک از ارتعاشات بنیادی محاسبه گردید. و سپس با توجه به موقعیت هر اتم قبل از ارتعاش و میزان جابه جایی بعد از هر ارتعاش محاسبه مختصات داخلی یعنی میزان تغییر طول، تغییر زوایا، و تغییر زوایای دو وجهی در هر ارتعاش محاسبه گردید. با استفاده از این مختصات داخلی توانستیم مختصات تقارنی را به دست آوریم. جزئیات این محاسبات در جایی دیگر توضیح داده شده است [۱۴-۱۵].

۳. نتایج و بحث

۳-۱. سد چرخشی

انرژی سد پتانسیل در مقابل دوران گروه های متیل و تری فلورو متیل در جدول ۱ داده شده اند. چنانکه در جدول ۱ نشان داده شده است، محاسبه سد پتانسیل برای چرخش گروه های CH_3 و CF_3 در سه سطح محاسباتی با توابع پایه به اندازه کافی بزرگ انجام شده است در همه این محاسبات انرژی سد چرخش متیل کمتر از تری فلورو متیل است. این نتیجه در تناقض با نتایج تجربی است. مقادیر انرژی محاسبه شده برای CH_3 به مقدار تجربی CF_3 نزدیک است و مقدار محاسبه شده برای گروه CF_3 به مقدار تجربی برای CH_3 نزدیکتر است. بنظر می رسد در این محاسبات اشتباه شده است. محاسبه سد پتانسیل چرخشی با روش های مختلف برای CH_3 و CF_3 به ترتیب در گستره $301-345$ و $362-492 \text{ cm}^{-1}$ است ولی مقادیر تجربی گزارش شده برای این گروه ها به ترتیب 392 ± 14 و $295 \pm 1 \text{ cm}^{-1}$ است. این نتایج نشان می دهند که سدهای انرژی تجربی وارونه محاسبه شده اند.

جدول ۱. انرژی سد پتانسیل در مقابل چرخش گروه‌های متیل و تری فلورو متیل در تری فلورو استون^a

سد چرخش CF ₃	سد چرخش CH ₃	سطح محاسباتی
362	301	MP2/Aug-cc-pVTZ
492	345	MP2/6-311G(2dp,pd)
373	314	MP2/6-311++G(3df,3pd)

^a انرژی بر حسب عدد موج cm⁻¹

۳-۲. تجزیه و تحلیل طیف ارتعاشی

مولکول تری فلورو استون، چنانکه محاسبات نشان می‌دهند، متعلق به گروه تقارنی Cs است. بنابراین این مولکول ۱۰ اتمی دارای ۱۵ ارتعاش داخلی صفحه ای و ۹ ارتعاش خارج صفحه ای است. تحلیل مختصات طبیعی فرکانسهای ارتعاشی تری فلورو استون در جدول ۲ و فرکانس های محاسبه شده در سطوح مختلف همراه با فرکانسهای مشاهده شده در جدول ۳ داده شده‌اند.

تعاریف مختصات داخلی و مختصات تقارنی به کار رفته برای محاسبات توزیع انرژی پتانسیل (PED) و تجزیه و تحلیل مختصات طبیعی (نرمال) در جدول ۳ داده شده‌اند. چنانکه اشاره شد، تعداد مختصات تقارنی برابر 3N-6 است و همه آنها روی ۲۴ مختصه طبیعی هنجار شده‌اند. چنانکه جدول ۳ نشان می‌دهد توافق بسیار خوبی بین فرکانسهای نا هماهنگ و مقادیر متناظر تجربی وجود دارد. طیف IR و رامان تری فلورو استون شبیه سازی شده با روش B3LYP/6-311++G(3df,3pd) به ترتیب در شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده‌اند. ساختار مولکول و نامگذاری اتم ها در شکل ۱ نشان داده شده‌اند.

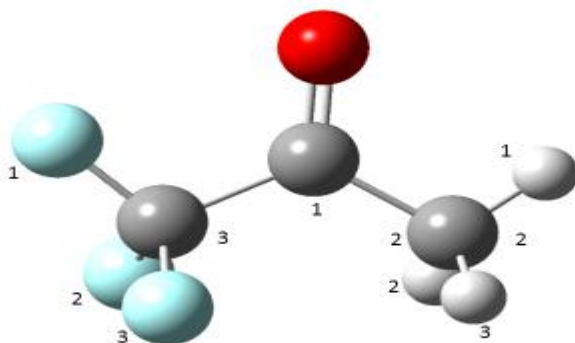
جدول ۲. مشخصات باند ارتعاشی مولکول تری فلورو استون.

No.	F1	Assignments (PED)	F2	Ref. [3]	Ref. [3]
A'					
v1	3003	vaCH ₃ (72), δsCH ₃ (11)	3029	va'CH ₃	v16
v2	2928	vsCH ₃ (66), vaCH ₃ (15), δsCH ₃ (9)	2939	vsCH ₃	v2
v3	1803	vC=O(52), dCCC(14), ρCF ₃ (10), ρCH ₃ (7)	1781	vC=O	v3
v4	1426	δaCH ₃ (45), ρCH ₃ (12), vsCH ₃ (9), δCCC(8), vCO(6)	1431	δaCH ₃	v4
v5	1369	δsCH ₃ (39), vaCC(11), δCCC(9), ρCH ₃ (9), vsCH ₃ (8)	1374	δsCH ₃	v5
v6	1279	vaCC(14), δsCH ₃ (15), δsCF ₃ (10), vsCF ₃ (9), vaCF ₃ (9), vsCC(9)	1320	vaCC	v6
v7	1180	vaCF ₃ (37), δaCF ₃ (19), δCCC(8), vaCC(8), vsCF ₃ (8)	1225	va'CF ₃	v18
v8	1097	vsCF ₃ (15), δsCF ₃ (12), ρCH ₃ (10), vsCC(9), δsCO(11)	1115	vsCF ₃	v8
v9	953	ρCH ₃ (18), δCCC(14), vaCC(15), δaCH ₃ (11), vsCC(10)	965	ρCH ₃	v9
v10	750	vsCF ₃ (29), δsCF ₃ (26), vsCC(18)	759	vsCC	v10
v11	611	δCO(21), vsCC(14), vaCF ₃ (11), δsCF ₃ (13), δaCF ₃ (9), ρCH ₃ (6)	616	δsCF ₃	v11
v12	551	δaCF ₃ (19), vaCF ₃ (15), δsCF ₃ (9), δCO(8), ρCH ₃ (7), ρCF ₃ (8)	564	δaCF ₃	v12
v13	412	δaCF ₃ (27), ρCF ₃ (16), δCO(10), vaCC(10), δsCF ₃ (8)	421	δCCC	v13
v14	360	δC=O(17), ρCF ₃ (14), δsCF ₃ (13), δaCF ₃ (13), vsCC(11), vaCC(8)	360	δCO	v14
v15	233	ρCF ₃ (34), δCCC(23), vsCF ₃ (13), vaCC(8), δCO(8)	231	ρCF ₃	v15
A''					
v16	2954	va'CH ₃ (91)	2969	vaCH ₃	v1
v17	1423	δa'CH ₃ (74), πCH ₃ (19)	1435	δa'CH ₃	v17
v18	1109	va'CF ₃ (43), δa'CF ₃ (17), πCF ₃ (14), πCH ₃ (11), γCO(10)	1164	va'CF ₃	v7
v19	1016	πCH ₃ (32), va'CF ₃ (28), δa'CF ₃ (11), da'CH ₃ (11), γC=O(14)	1024	πCH ₃	v19

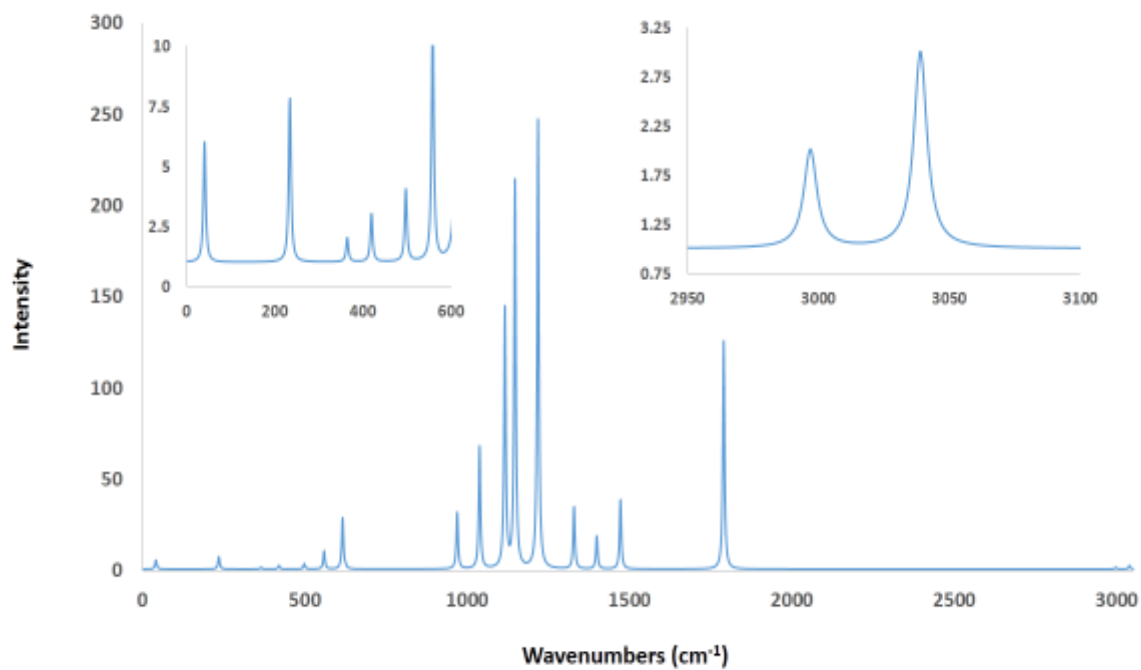
v20	619	$\gamma\text{CO}(25), \pi\text{CF}_3(21), \rho\text{CH}_3(19), \delta_a'\text{CF}_3(15), \nu_a'\text{CF}_3(13)$	625	$2\nu_{23} + \nu_{15}$	
v21	493	$\delta_a'\text{CF}_3(47), \gamma\text{CO}(19), \pi\text{CF}_3(11), \pi\text{CH}_3(10)$	499	$\delta_a'\text{CF}_3$	v20
v22	232	$\pi\text{CF}_3(52), \gamma\text{C=O}(28)$	246	πCF_3	v22
v23	114	$\tau\text{CH}_3(82), \tau\text{CF}_3(17)$	121	τCH_3	v23
v24	*	$\tau\text{CF}_3(82), \tau\text{CH}_3(17)$	40	τCF_3	v24

^a $\nu, \delta, \pi, \rho, \tau, \gamma$, are stand for stretching, deformation, out-of-plane rocking, in-plane bending, torsion, and out-of-plane bending vibrations; a and s stand for asymmetric and symmetric vibrations, respectively; primed symbols stand for out-of-plane movements. F1, calculated anharmonic wavenumbers obtained at the B3LYP/6-311++G(3df,3pd); F2, observed wavenumbers (gas phase),

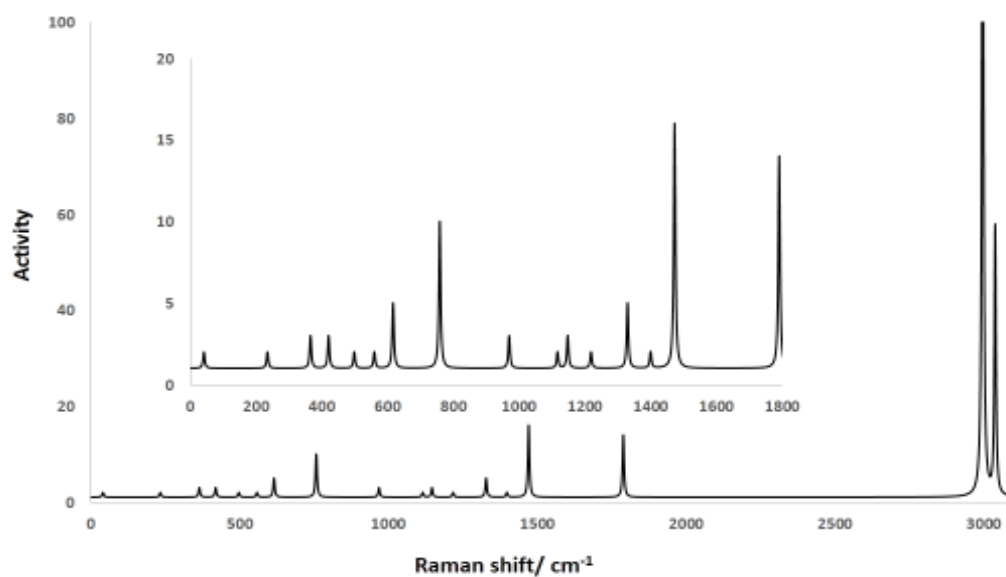
با توجه به جدول ۲ مشاهده می شود که تناقض های زیادی بین انتساب نوارهای ارتعاشی مشاهده شده به شیوه های نرمال داده شده توسط Durig و Church با آنچه که در این پژوهش به دست آمده است وجود دارد. از جمله نوار ارتعاشی 3029 و 2969 cm^{-1} است که طبق محاسبات ما اولی یک حرکت داخل صفحه و دومی یک ارتعاش خارج از صفحه است ولی Durig و همکارش [۳] وارونه آن را در نظر گرفتند. حرکت ارتعاشی کششی متقارن در 2928 cm^{-1} پیش بینی شده است که مقدار تجربی فاز گازی آن 2938 cm^{-1} است. نکته جالب در این جا آن است که نوارهای ارتعاشی کششی نامتقارن داخل صفحه و متقارن هردو به میزان قابل توجهی با حرکت خمشی متقارن گروه CH_3 مخلوط شده اند. حرکت کششی C=O نیز به مقدار زیادی با خمش CCC و حرکت های جنبانه ای (rocking) گروه های CH_3 و CF_3 مخلوط شده است. این یک امر طبیعی است زیرا در حرکت کششی C=O به منظور حفظ مرکز ثقل مولکول اتم C بیشتر از اتم O جابه جا می شود. نتیجه این امر آن است که زاویه CCC با یک حرکت نوسانی تغییر کند. جابه جایی اتم کربن میانی خود باعث ایجاد حرکت جنبانه ای (rocking) در گروه های CH_3 و CF_3 می شود. حرکت خمشی متقارن CH_3 در 1374 cm^{-1} ظاهر می شود که تفاوت اندکی با مقدار متناظر محاسبه شده دارد 1369 cm^{-1} ارتعاشات خمشی نامتقارن CH_3 در حدود 1430 cm^{-1} ظاهر می شوند. این ارتعاشات نیز کاملاً خالص نیستند و با حرکت های جنبانه ای CH_3 و حرکت ارتعاشی خمشی CCC نیز مخلوط می شوند. سه نوار مشاهده شده در $1225, 1115, 1164 \text{ cm}^{-1}$ به ارتعاشات کششی C-F گروه CF_3 مربوط می شوند. دو نوار اول از گونه تقارنی A' و نوار آخری از گونه تقارنی A'' است.



شکل ۱- تری فلورو استون و شماره گذاری آنها



شکل ۲. طیف IR تری فلورو استون شبیه سازی شده با روش (B3LYP/6-311++G(3df,3pd)



شکل ۳. طیف رامان تری فلورو استون شبیه سازی شده با روش (B3LYP/6-311++G(3df,3pd)

جدول ۳. فرکانسهای ارتعاشی بنیادی محاسبه شده و مشاهده شده تری فلورو استون در فاز گازی. ^a

شماره	F1	F1a	F1s	F2	I _{IR}	F3	F3a	I _{IR}	R _a	Fob
A'										
v1	3190	3039	3030	3153	3	3156	3003	2	56	3029
v2	3077	2997	2923	3042	0	3045	2928	0	133	2939
v3	1824	1789	1777	1837	161	1840	1804	125	13	1781
v4	1501	1471	1462	1466	27	1467	1426	26	9	1431
v5	1424	1398	1387	1393	22	1394	1369	18	1	1333
v6	1351	1328	1316	1308	45	1312	1279	34	4	1320
v7	1243	1217	1211	1198	271	1206	1180	246	1	1225
v8	1138	1115	1109	1116	159	1121	1097	142	1	1115
v9	981	968	956	967	34	967	953	31	2	965
v10	767	757	748	754	1	760	750	0	9	766
v11	622	615	606	616	28	618	611	28	4	616
v12	562	558	547	552	11	555	551	10	1	564
v13	423	419	412	415	2	416	412	2	2	421
v14	363	364	354	357	1	359	360	1	2	360
v15	230	234	224	226	5	227	233	5	0	237
A''										
v16	3144	2997	2986	3101	1	3102	2954	1	49	2971
v17	1499	1471	1460	1467	13	1469	1423	12	6	1455
v18	1170	1146	1139	1124	245	1133	1109	212	2	1115
v19	1057	1037	1030	1036	68	1039	1016	67	0	1024
v20	631	624	614	622	1	624	619	1	0	625
v21	499	497	486	494	3	496	493	3	1	499
v22	233	233	227	230	2	232	233	2	1	246
v23	114	80	111	110	0	114	57	0	0	95
v24	26	-24	25	33	5	32	-33	5	1	40

^a F1، F1a، و Fs به ترتیب عبارتند از فرکانسهای ارتعاشی هماهنگ، ناهماهنگ، و مقیاس شده محاسبه شده در سطح B2PLYP/6-311G(d). F2 فرکانس

هماهنگ محاسبه شده در سطح B3LYP/6-311++G**، F3 و F3a به ترتیب فرکانسهای هماهنگ و ناهماهنگ محاسبه شده در سطح B3LYP/6-

311++G(3df,3pd).

نوار مشاهده شده در 1225 cm^{-1} طبق محاسبات ما یک حرکت داخل صفحه ای است (v7) ولی Durig آن را به یک حرکت خارج از صفحه نسبت داده است (v18). از طرف دیگر Durig حرکت خارج از صفحه کششی CF (v18) را به یک حرکت داخل صفحه ای منتسب کرد (v7). از دیگر اختلاف انتساب های دیده شده در جدول ۲ می توان به نوار ضعیف 625 cm^{-1} اشاره کرد که Durig این نوار را به یک نوار ترکیبی مرتبط کرد [۳]. ولی چنانکه در جدول ۲ مشاهده می شود، این نوار به v20 مربوط می شود.

Durig و Church [۳] نوار ضعیف در طیف رامان گازی و مایع در 370 cm^{-1} را به v21 (خمش خارج از صفحه C=O) نسبت دادند. چنانکه جدول ۲ نشان می دهد، حرکت خمشی خارج از صفحه C=O در شیوه های ارتعاشی v18-v22 سهم قابل ملاحظه ای دارد. این محققین نوار 1024 cm^{-1} را به یکی از نوارهای گونه A' نسبت دادند. نکته قابل توجه آن است که این محققین نوار رامان فاز گازی در 990 cm^{-1} را معادل نوار IR در 1024 cm^{-1} در نظر گرفتند که این مقدار تفاوت قابل قبول نیست.

۴. نتیجه گیری

با استفاده از روش DFT در سطح B3LYP/6-311++G(3df,3pd) طیف ارتعاشی IR و رامان تری فلورو استون شبیه سازی شد. با استفاده از مختصات جابه جایی محاسبه شده از خروجی گوسین مختصات تقارنی و مختصات نرمال ارتعاشات بنیادی محاسبه و توزیع انرژی پتانسیل این ارتعاشات محاسبه شد. نتایج به دست آمده برای توزیع انرژی پتانسیل ارتعاشات مولکولی در اغلب موارد با نتایج قبلی همخوانی دارد و لی نشان داده شد که چند انتساب ارتعاشی قبلی نیز صحیح نیستند. علاوه بر آن سد انرژی پتانسیل در مقابل چرخش گروههای متیل و تری فلورو متیل نیز محاسبه گردید و نشان داده شد که سد های محاسبه شده قبلی درست نبوده است. با استفاده از روش MP2/6-311++G(3df,3pd) سد چرخش برای CH_3 و CF_3 به ترتیب ۳۶۲ و ۳۰۱cm^{-1} است. محاسبات ما نشان می دهند که نتیجه گیریهای Durig در باره انرژی های سد چرخشی گروههای متیل و تری فلورو متیل وارونه است و نیاز به بازنگری دارد.

۵. مراجع

- [1] H.J. Buschmann, H.H. Fuedner, W. Knoche, *Ber. Bunsen-Ges.*, 84 (1980) 41.
- [2] P. Saaidi, M. Guyonnet, E. Jeanneau, P. Fleuret-Lessardt, J. Hasserodt, *J. Org. Chem.*, 73 (2008) 1209.
- [3] J.R. Durig, J.S. Church, *Spectrochim. Acta Part A*, 36 (1979) 957.
- [4] A.L. Andreassen and S. H. Bauer, *J. Mofec. Sffucr.*, 12 (1972) 381.
- [5] J.R. Durig, A.R. Fanning, T.G. Sheehan, G.A. Guirgis, *Spectrochimica Acta, Part A*, 41 (1991) 279.
- [6] P. Groner, G.A. Guirgis and J.R. Durig, *J. Chem. Phys.*, 86 (1987) 565.
- [7] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J.A. Montgomery Jr., J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J.J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, O. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, D.J. Fox, Gaussian 09, Revision A.02, Gaussian Inc., Wallingford, CT, (2009).
- [8] A.D. Becke, *Phys. Rev. A*, 38 (1988) 3098.
- [9] A.D. Becke, *J. Chem. Phys.*, 98 (1993) 5648.
- [10] V. Barone, *J. Chem. Phys.*, 122 (2005) 1.
- [11] V. Barone, *J. Chem. Phys.*, 120 (2004) 3059.
- [12] D.A. Clabo, W.D. Allen, R.B. Remington, Y. Yamaguchi and H.F. Schaefer, *Chem. Phys.*, 123 (1988) 187.
- [13] M. Head-Gordon and T. Head-Gordon, *Chem. Phys. Lett.*, 220 (1994) 122.
- [14] F. Dolati, S.F. Tayyari, M. Vakili, *J. Mol. Struct.*, 1094 (2015) 264.
- [15] S. Soltani-Ghoshkhaneh, M. Vakili, S.F. Tayyari, A-R Berenji, *J. Mol. Struct.*, 1103 (2016) 35.