# Dinâmica e Espectroscopia dos Complexos de van der Waals D<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-PO<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-CH<sub>4</sub>, ND<sub>3</sub>-D<sub>2</sub>, ND<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> e ND<sub>3</sub>-CH<sub>4</sub>

Dynamics and Spectroscopy of van der Waals complexes D<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-O<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-CH<sub>4</sub>, ND<sub>3</sub>-D<sub>2</sub>, ND<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> and ND<sub>3</sub>-CH<sub>4</sub>

DOI:10.34117/bjdv6n12-057

Recebimento dos originais: 10/11/2020 Aceitação para publicação: 04/12/2020

# Rhuiago Mendes de Oliveira

Doutorado em Física pela Universidade de Brasília Instituto Federal de Educação, Ciências e Tecnologia do Maranhão - Campus Bacabal Grupo de Pesquisa em Química, Meio Ambiente e Ensino de Ciências – IFMA Av. João Alberto, 1840, Bacabal - MA, 65700-000 E-mail: rhuiago.oliveira@ifma.edu.br

#### Salvino Coimbra Filho

Mestrado Profissional em Matemática pela Universidade Federal do Piauí Instituto Federal de Educação, Ciências e Tecnologia do Maranhão - Campus Bacabal Av. João Alberto, 1840, Bacabal - MA, 65700-000 E-mail: salvino.filho@ifma.edu.br

### Francisco de Assis Parentes da Silva do Amaral Ferreira

Mestrado Profissional em Matemática pela Universidade Federal do Piauí Instituto Federal de Educação, Ciências e Tecnologia do Maranhão - Campus Bacabal Av. João Alberto, 1840, Bacabal - MA, 65700-000 E-mail: francisco.amaral@ifma.edu.br

## Jesuino da Silva Costa Martins

Mestrado em Genética e Melhoramento pela Universidade Federal do Piauí Instituto Federal de Educação, Ciências e Tecnologia do Maranhão - Campus Buriticupu R. Deputado Gastão Vieira, 1000 - Vila Mansueto, Buriticupu - MA, 65393-000 E-mail: jesuino.martins@ifma.edu.br

## Josyane dos Santos Braga

Mestrado em Engenharia dos Materiais pelo Instituto Federal do Piauí Instituto Federal de Educação, Ciências e Tecnologia do Maranhão - Campus Zé Doca Rua da Tecnologia, 215 - Bairro Amorim, Zé Doca - MA, 65365-000 E-mail: josyane.santos@ifma.edu.br

# Francisco Deilson Rodrigues Barbosa de Sousa

Mestrado Profissional em Matemática pela Universidade Federal do Maranhão Instituto Federal de Educação, Ciências e Tecnologia do Piauí - Campus Picos Av Pedro Marques de Medeiros, s/n - Parque Industrial, Picos - PI, 64600-000 E-mail: francisco.deilson@ifpi.edu.br

## **RESUMO**

Neste trabalho calculamos as energias e as constantes espectroscópicas rovibracionais dos sistemas D<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-O<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-CH<sub>4</sub>, ND<sub>3</sub>-D<sub>2</sub>, ND<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> e ND<sub>3</sub>-CH<sub>4</sub>. As curvas de energia potenciais

foram obtidas a partir da forma analítica *Improved Lennard-Jones* (ILJ). De posse desta forma analítica as energias rovibracionais e as constantes espectroscópicas foram obtidas através de duas abordagens distintas. A primeira combina as energias obtidas via solução da Equação de Schrödinger nuclear com uma equação espectroscópica. Na segunda aplica-se o método de *Dunham*. As constantes espectroscópicas obtidas pelas duas metodologias estão em excelente acordo.

Palavras-chave: água, constantes espectroscópicas, dunham, DVR, energias rovibracionais.

#### **ABSTRACT**

In this work we calculated the rovibrational energies and spectroscopic constants of the systems D<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-O<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-CH<sub>4</sub>, ND<sub>3</sub>-D<sub>2</sub>,ND<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> and ND<sub>3</sub>-CH<sub>4</sub>. The potential energies curve were obtained from the analytic form of *Improved Lennard-Jones*(ILJ). From this analytic form, the rovibrational energies and spectroscopic constants were obtained via two different approaches The first one combines the solution of the nuclear Schrödinger's equation with a spectroscopic equation. On the second one, were applied the Dunham's method. Both methods yielded spectroscopic constants in excellent agreement with each other.

**Keywords:** Dunham, DVR, rovibrational energies, spectroscopic constants, water.

# 1 INTRODUÇÃO

Sistemas que envolvem amônia e água em interação com outras moléculas simples como hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e metano afetam a dinâmica de vários processos elementares que ocorrem em atmosferas planetárias e nuvens interestelares (PIRANI *et al.*, 2013; VALIRON *et al.*, 2008). Uma compreensão completa de tais processos baseia-se em comparações detalhadas entre experiência e teoria, as quais por sua vez dependem da disponibilidade de superfícies de energia potenciais precisas. Existem várias superfícies potenciais a*b initio* desenvolvidas para o sistema H<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>(BALASUBRAMANIAN *et al.*, 1993; PHILLIPS *et al.*, 1994), bem como resultados experimentais com o qual pode –se testar esses potenciais (WEIDA *et al.*, 1999; SLANKA; KEIL, KUPPERMANN, 1979).

A superfície da energia potencial H<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub> é de grande importância para a química quântica, pois fornece casos para testes de interações entre a água e outras moléculas (VALIRON *et al.*, 2008). Dessa forma esse conhecimento é necessário para a compreensão detalhada de importantes processos astrofísicos, tais como a excitação colisional da água, incluindo o bombeamento de maser de água e a formação de hidrogênio molecular em grãos de poeira interestelar geladas.

Os complexos de van der Waals de espécies moleculares são de importância fundamental para a compreensão das interações químicas fracas. Vários trabalhos teóricos e experimentais procuraram aumentar o conhecimento sobre os potenciais interatômicos devan der Waals. Experiências de feixes moleculares realizadas por Pirani *et al.* (2013) mostraram que os sistemas aqui estudados podem ser descritos por um potencial radial simples. Assim, na gama intermediária ou longa, esses sistemas

podem ser tratados como um sistema diatômico, cuja energia de interação é dada por um potencial efetivo radial V(R).

Sistemas diatômicos no estado eletrônico fundamentais podem apresentar várias energias de dissociação diferentes. Para que o sistema seja considerado estável, além da energia de dissociação ser mínima, o sistema deve conter também pelo menos um estado de vibração de energia menor do que a energia de dissociação da molécula. Como as interações não covalentes são muito difíceis de tratar explicitamente de forma *ab initio*, as curvas de energia dos sistemas D<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-O<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-CH<sub>4</sub>, ND<sub>3</sub>-D<sub>2</sub>,ND<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> e ND<sub>3</sub>-CH<sub>4</sub> utilizadas nesse trabalho foram obtidas por Roncaratti e colaboradores com experiência de feixes moleculares na universidade de Perugia.

Por razões de comparação, também foram obtidas as constantes espectroscópicas por aplicação do método de *Dunham* que utiliza a teoria de perturbação para encontrar uma expressão para as constantes espectroscópicas de cada sistema, em termos das derivadas da curva de energia potencial. É importante notar que os dois métodos produziram constantes espectroscópicas numa boa concordância, portanto, esse fato indica que a nossa metodologia foi adequada para o tratamento desse tipo de sistema.

## 2 MATERIAL E MÉTODOS

As moléculas estão sujeitas a duas forças distintas, no limite de menor e maior separação. Essas forças são respectivamente, a força repulsiva em menores distâncias e a fora atrativa a longas distâncias. O potencial de Lennard–Jones (LJ) descreve este comportamento das moléculas. O modelo Improved Lennard–Jones (ILJ) (PIRANI *et al.*, 2008), considerado adequado para a formulação V(R) para vários sistemas de natureza diferente e de crescente complexidade (CAPPELLETTI *et al.*, 2012; AQUILANTI *et al.*, 2009; BELPASSI, *et al.*, 2010). Destaca-se como um modelo interessante que elimina a maioria das insuficiências do modelo LJ original, particularmente aquelas de curto e longo alcance. Isso é feito de uma forma elegante através da consideração de um único parâmetro extra. A função potencial IJL é dada da seguinte forma:

$$V(R) = \varepsilon \left[ \frac{6}{n(R) - 6} \left( \frac{R_e}{R} \right)^{n(R)} - n \frac{(R)}{n(R) - 6} \left( \frac{R_e}{R} \right)^6 \right]$$
 (1)

Onde:

$$n(R) = \beta + 4(\frac{R}{R_e})^2 \tag{2}$$

Nas equações acima  $\epsilon$  e  $r_m$  representam respectivamente a profundidade do potencial (energia de dissociação) e a sua localização (distância de equilíbrio),  $\beta$  é um fator associado à dureza das espécies químicas envolvidas, determinando a forma do potencial na região do poço, o valor de  $\beta$  foi constante para os sistemas homólogos. Para os sistemas descritos foi utilizado  $\beta$  = 9, um valor típico para interações moleculares fracas entre as espécies neutras (BELPASSI, *et al.*, 2010). Os parâmetros possíveis para cada sistema D<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-O<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-CH<sub>4</sub>, ND<sub>3</sub>-D<sub>2</sub>, ND<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> e ND<sub>3</sub>-CH<sub>4</sub> são representados na Tabela 1.

Tabela1: Parâmetros potenciais para cada sistema molecular. IFMA, 2016.

,						
Sistema	$\varepsilon(\text{meV})$	$R_e(\mathring{A})$				
$D_2O-D_2$	8.2	3.45				
$D_2O-N_2$	13.4	3.72				
$D_2O-O_2$	13.7	3.73				
$D_2O$ - $CH_4$	17.5	3.80				
ND <sub>3</sub> -D <sub>2</sub>	7.0	3.73				
$ND_3$ - $O_2$	13.5	3.88				
ND <sub>3</sub> -CH <sub>4</sub>	19.0	39.2				

Usando os dados da Tabela 1 na equação 1, obtemos as curvas de energia potencial (CEP) de cada sistema, conforme a Figura 1.

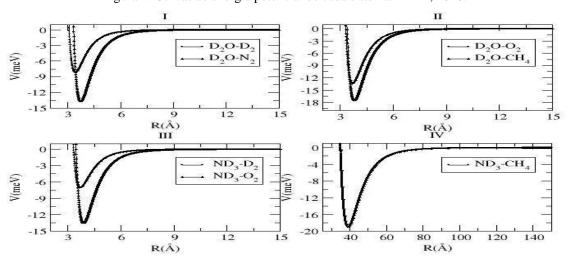


Figura 1: Curvas de energia potencial de cada sistema. IFMA, 2016.

As constantes espectroscópicas rovibracionais foram então avaliadas por duas abordagens distintas. A primeira consiste na representação da variável discreta (DVR), que é uma aproximação que se baseia na expansão da função de onda em conjunto de funções de base ortonormal e utilização de

regras de quadraturas para computar as integrais envolvidas (SOARES NETO; COSTA, 1998; OSTLUND; SZABO, 1996).

Assim os elementos de matrizes de energia potencial (calculados apenas nos pontos de quadraturas gaussianas) tornam-se diagonais e os elementos de matrizes do operador energia cinética passam a ser calculados analiticamente. Portanto, as energias rovibracionais  $E_{\upsilon,J}$ , onde  $\upsilon$  e J, representam respectivamente a vibração e os números quânticos rotacionais, ambos surgem a partir da equação de Schrödinger nuclear (MURRELL, 1984).

$$E_{v,J} = (v + \frac{1}{2})\omega_e - (v + \frac{1}{2})^2\omega_e x_e + (v + \frac{1}{2})^3\omega_e \gamma_e + \dots + [B_e - \alpha_e(v + \frac{1}{2}) + \gamma_e(v + \frac{1}{2})^2 + \dots]J(J+1) + \dots$$
(3)

Nesta expressão  $B_e = \frac{\hbar}{2Ihc}$ , é a constante rotacional de equilíbrio, h a constante de Planck, e c a velocidade da luz e  $\mu$  a massa reduzida do sistema.

Substituindo os valores das energias rovibracionais  $E_{\upsilon,J}$  obtidas através da resolução da equação de Schrödinger nuclear pode-se montar um sistema de equações para as constantes espectroscópicas rovibracionais, como segue:

$$\omega_{e} = \{141[E(1,0) - E(0,0)] - 93[E(2,0) - E(0,0)] + 23[E(3,0) - E(1,0)]$$

$$\omega_{e}x_{e} = \{13[E(1,0) - E(0,0)] - 11[E(2,0) - E(0,0)] + 3[E(3,0) - E(1,0)]$$

$$\omega_{e}\gamma_{e} = \{3[E(1,0) - E(0,0)] - 3[E(2,0) - E(0,0)] + [E(3,0) - E(1,0)]\}$$

$$\alpha_{e} = \{-12[E(1,1) - E(0,1)] + 4[E(2,1) - E(0,1)] + 4\omega_{e} - 23\omega_{e}\gamma_{e}\}/$$

$$\gamma_{e} = \{-2[E(1,1) - E(0,1)] + [E(2,1) - E(0,1)] + 2\omega_{e} - 9\omega_{e}\gamma_{e}\}/8\}$$

$$(4)$$

A segunda abordagem utilizada para encontrar as constantes espectroscópicas, foi o método de Dunham (DUNHAM, 1932). Através da teoria da perturbação é possível encontrar uma expressão para a energia rovibracional de uma molécula diatômica em termo das derivadas do potencial na distância internuclear de equilíbrio  $R_e$ :

$$V(R) = V(R_e) + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2 V}{dR^2}\right)_{R_e} (R - R_e)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{d^3 V}{dR^3}\right)_{R_e} (R - R_e)^3$$

$$\frac{1}{4!} \left(\frac{d^4 V}{dR^4}\right)_{R_e} (R - R_e)^4 + C$$
(5)

# ${\mathcal J}$ razilian ${\mathcal J}$ ournal of ${\mathcal D}$ evelopment

Relacionado as equações (3) e (5), obtemos as constantes espectroscópicas rovibracionais dada abaixo:

$$\omega_{e} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{d_{2}}{m}}$$

$$\alpha_{e} = -6B_{e}^{2} (\omega_{e}^{-1} + \frac{R_{e}d_{3}}{3\omega_{e}d_{2}})$$

$$\omega_{e}x_{e} = \frac{B_{e}R_{e}}{8d_{2}} \{\frac{d_{2}}{R_{e}^{2}} [15(1 + \frac{\alpha_{e}\omega_{e}}{6B_{e}^{2}})^{2}] - d_{4}\}$$

$$\text{Com: } (\frac{d^{2}V}{dR^{2}})_{R_{e}} = d_{2}, (\frac{d^{3}V}{dR^{3}})_{R_{e}} = d_{3}, \text{ and } (\frac{d^{4}V}{dR^{4}})_{R_{e}} = d_{4}.$$

$$(6)$$

## 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A fim de melhor apresentar e comparar os nossos resultados, os sistemas analisados são apresentados em ordem crescente de energia de dissociação, ou seja, D<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub> < D<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub> < D<sub>2</sub>O-O<sub>2</sub> < D<sub>2</sub>O-CH<sub>4</sub> < ND<sub>3</sub>-D<sub>2</sub> < ND<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> < ND<sub>3</sub>-CH<sub>4</sub>. Começamos nossa analise, apresentando os resultados para os primeiros quinze níveis de energia, juntamente com a curva de energia potencial de cada sistema. A Tabela 2 apresenta as energias menores do que a energia de dissociação para cada sistema. Pode-se observar pela Tabela 2 que a contribuição rotacional (J=1) nos níveis de energia de cada sistema e bem pequena, sendo estes níveis quase que predominantemente vibracionais (J=0), o que esta de acordo com a literatura.

Os cálculos das constantes espectroscópicas seguem duas abordagens diferentes. Começando com a metodologia DVR, primeiro devemos observar que o calculo não foi realizado para o sistema D<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub> e ND<sub>3</sub>-D<sub>2</sub>. Esta é uma consequência do pequeno numero de estados vibracionais excitados presentes para esse sistema. Pode-se ver na Tabela 2, que estes sistemas apresentam menos de cinco estados excitados (mais precisamente dois). Como fazemos uso da equação 4, a pouca quantidade de energias disponíveis renderia um sistema indeterminado, uma vez que existem 5 constantes espectroscópicas desconhecidas.

Tabela 2: Energias rovibracionais  $E_{\nu,J}$  em cm $^{-1}$  para cada sistema. IFMA, 2016.

υ	J	D <sub>2</sub> O-D <sub>2</sub>	D <sub>2</sub> O-N <sub>2</sub>	D <sub>2</sub> O-O <sub>2</sub>	D <sub>2</sub> O-CH <sub>4</sub>	ND <sub>3</sub> -D <sub>2</sub>	ND <sub>3</sub> -O <sub>2</sub>	ND <sub>3</sub> - CH <sub>4</sub>
0		28.55356 5	20.04394	19.36731 9	20.42482	23.01603 56	13.79870	1.45572
1		59.82406 9	53.38371 6	51.66757 1	55.88522	49.60053 19	38.23481	4.34350
2			78.14499 3	75.78175 0	84.41478		58.58618	7.20003
3			94.94202 6	92.27988 8	106.3216		74.99483	10.0253
4			104.7998 5	92.27988 8	122.0641		87.65906	10.0253
5			109.3162 4	106.7354	132.3316		96.86321	15.5826
6					138.0982		103.0085 7	18.3146
7					140.7379		106.6245 6	21.0156
8	0						108.4263 4	23.6856
9								26.3248
10								28.9331
11								31.5106
12								34.0573 4
13								36.5733
14								39.0587
0		29.29589 1	20.24244	19.55664 4	20.58407	23.57538 29	13.89232	1.45643
1		60.29888	53.56254 0	51.83841 0	56.03247	49.97871 1	38.32239	4.34421
2			78.30124 5	75.93143 1	84.54874		58.66718	7.20073
3			95.07193 4	92.40493 4	106.4406		75.06856	10.0260

4		 104.8988 7	102.2040	122.1662 8		87.72473	12.8202
5		 109.3806 9	106.7989	132.4146 8		96.91987	15.5833 0
6		 		138.1596		103.0552 1	18.3153 1
7		 		140.7812 0		106.6601 0	21.0163
8	1	 			108.4523 1		23.6863
9		 					26.3255 0
10		 					28.9337 9
11		 					31.5112
12		 					34.0580 1
13		 					36.5740 5
14		 					39.0594 6

Uma maneira simples de descrever as dificuldades da metodologia DVR é aplicar o método de Dunham. Através deste procedimento, todas as constantes espectroscópicas podem ser obtidas de uma aproximação tão precisa quanto se deseja. Os resultados de ambas as metodologias são apresentados na Tabela 3, para uma melhor comparação.

Tabela 3: Constantes espectroscópicas em cm<sup>-1</sup> para cada sistema. IFMA, 2016.

Sistema	Método	ωe	$\omega_{\mathrm{e}} \mathrm{x}_{\mathrm{e}}$	$\omega_e \gamma_e$	$\alpha_{\mathrm{e}}$	γe
$D_2O-D_2$	DVR					
	Dunham	66.01088	18.76645	0.46663	0.09301	-0.01292
$D_2O-N_2$	DVR	42.50692	4.74993	0.10237	0.00839	-0.00072
	Dunham	42.295247	4.56620	0.04397	0.00873	-0.00046
$D_2O-O_2$	DVR	41.03260	4.52056	0.09500	0.00790	-0.00066
	Dunham	40.83880	4.35226	0.04137	0.00822	-0.00043
D <sub>2</sub> O-CH <sub>4</sub>	DVR	42.68646	3.69646	0.05134	0.00534	-0.00032
	Dunham	42.60494	3.62489	0.02754	0.00547	-0.00023
ND <sub>3</sub> -D <sub>2</sub>	DVR	-	-	-	-	-

ND <sub>3</sub> -O2	Dunham	52.68218	13.98188	0.32550	0.06485	-0.00843
	DVR	28.65694	2.14887	0.02366	0.00274	-0.00013
	Dunham	28.62506	2.12061	0.01403	0.00278	-0.00010
ND <sub>3</sub> -CH <sub>4</sub>	DVR	2.919066	0.01565805	7.73x10 <sup>-6</sup>	1.52x10 <sup>-6</sup>	-3.77x10 <sup>-9</sup>
	Dunham	2.919092	0.01565660 23	7.51 x10 <sup>-6</sup>	1.49 x10 <sup>-6</sup>	-3.97 x10 <sup>-9</sup>

Duas características merecem destaque na Tabela 3. Primeira, podemos observar uma boa concordância entre as duas metodologias o que indica a boa qualidade dos nossos resultados, bem como a adequação de ambas as abordagens aos sistemas tratados. A segunda é a ausência de padrão na constante espectroscopia harmônica ( $\omega e$ ) devido ao fato de que estes sistemas são altamente anarmônicos, como o valor apreciável das outras constantes sugere.

# 4 CONCLUSÕES

Neste trabalho apresentamos as energias rovibracionais e as constantes espectroscópicas calculados para os complexos D<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-O<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O-CH<sub>4</sub>, ND<sub>3</sub>-D<sub>2</sub>, ND<sub>3</sub>-O<sub>2</sub> e ND<sub>3</sub>-CH<sub>4</sub>. Nossos cálculos foram baseados em curvas de energias potenciais obtidos através de experiências de dispersão de feixe moleculares. As constantes espectroscópicas rovibracionais calculadas com as metodologias de DVR e *Dunham* estão em excelente acordo. Esta é uma forte indicação da adequação de nossa metodologia para descrever estes complexos. Embora os complexos D<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub> e ND<sub>3</sub>-D<sub>2</sub> tenham uma pequena profundidade do poço de potencial, observou-se que estes possuem dois estados vibracionais. Este resultado sugere que estes sistemas podem permanecer ligados mesmo com energia de dissociação pequena. O presente estudo foi motivado pela importância das ligações moleculares fracas em áreas que vão desde a química de processos elementares a bioquímica. A melhor compreensão desses sistemas possibilitará a formulação de potenciais capaz de descrever adequadamente tanto a estática e as propriedades dinâmicas destes e de mais sistemas.

## REFERÊNCIAS

AQUILANTI, Vincenzo et al. Velocity selection and mass spectrometric detection of an H 2 S molecular beam and a collisional study of its interactions with rare gases. International Journal of Mass Spectrometry, v. 280, n. 1, p. 72-77, 2009.

BALASUBRAMANIAN, V.; BALINT-KURTI, Gabriel G.; VAN LENTHE, J. H. Computation of Inelastic Rotational Rates and Collision Cross-sections for Astrophysically Important Systems: H,+ H, O and the Water Maser. J. Chem. Soc. Faraday Trans, v. 89, n. 13, p. 2239-2253, 1993.

BELPASSI, Leonardo et al. Charge-Transfer Energy in the Water—Hydrogen Molecular Aggregate Revealed by Molecular-Beam Scattering Experiments, Charge Displacement Analysis, and ab Initio Calculations. Journal of the American Chemical Society, v. 132, n. 37, p. 13046-13058, 2010

CAPPELLETTI, David et al. Revealing charge-transfer effects in gas-phase water chemistry. Accounts of chemical research, v. 45, n. 9, p. 1571-1580, 2012.

DUNHAM, J. L. The energy levels of a rotating vibrator. Physical Review, v. 41, n. 6, p. 721, 1932.

MURRELL, John Norman. Molecular potential energy functions. J. Wiley, 1984.

OSTLUND, Neil S.; SZABO, Attila. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Dover Publications Inc, 1996.

PHILLIPS, Timothy R. et al. Anisotropic rigid rotor potential energy function for H2O–H2. The Journal of chemical physics, v. 101, n. 7, p. 5824-5830, 1994.

PIRANI, Fernando et al. Beyond the Lennard-Jones model: a simple and accurate potential function probed by high resolution scattering data useful for molecular dynamics simulations. Physical Chemistry Chemical Physics, v. 10, n. 36, p. 5489-5503, 2008.

PIRANI, Fernando et al. Intermolecular Interaction in the NH3–H2 and H2O–H2 Complexes by Molecular Beam Scattering Experiments: The Role of Charge Transfer. The Journal of Physical Chemistry A, v. 117, n. 47, p. 12601-12607, 2013.

SLANKAS, John T.; KEIL, Mark; KUPPERMANN, Aron. Scattering of thermal He beams by crossed atomic and molecular beams. IV. Spherically symmetric intermolecular potentials for He+ CH4, NH3, H2O, SF6. The Journal of Chemical Physics, v. 70, n. 3, p. 1482-1491, 1979.

SOARES NETO, J. J.; COSTA, L. S. Numerical generation of optimized discrete variable representations. Brazilian journal of physics, v. 28, n. 1, p. 1-11, 1998.

VALIRON, Pierre et al. R12-calibrated H2O-H2 interaction: Full dimensional and vibrationally averaged potential energy surfaces. The Journal of chemical physics, v. 129, n. 13, p. 134306, 2008.

WEIDA, Miles J. et al. High-Resolution Diode Laser Study of H2H2O van der Waals Complexes: H2O as Proton Acceptor and the Role of Large Amplitude Motion. J. Chem. Phys, v. 110, p. 156-167, 1999.