

Tempo de vida dos sistemas CCl₄ com Gn (Gn= He, Ne e Ar), O₂, D₂O e ND₃

CCl₄ systems' lifetime with Ng (Ng= He, Ne and Ar), O₂, D₂O and ND₃

Vida útil de los sistemas CCl₄ con Gn (Gn = He, Ne y Ar), O₂, D₂O y ND₃

Recebido: 17/03/2022 | Revisado: 23/03/2022 | Aceito: 25/03/2022 | Publicado: 01/04/2022

Maria Elane Aquino dos Santos Paula

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5335-4214>

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Maranhão, Brasil

E-mail: maria.elane@acad.ifma.edu.br

Francisco Antonio Gudemberg Almeida Moura

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-3693-0571>

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Maranhão, Brasil

E-mail: gudemberg.moura@ifma.edu.br

Rhuiago Mendes de Oliveira

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6964-2808>

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Maranhão, Brasil

E-mail: rhuiago.oliveira@ifma.edu.br

Resumo

As propriedades de sistemas envolvendo gases nobres têm auxiliado muito no desenvolvimento de técnicas de modelagem e de valores padrão para estudos experimentais. O objetivo desse trabalho foi calcular o tempo de vida dos sistemas moleculares formados pelo hélio, neônio, argônio, dióxigênio, água deuterada, amônia deuterada e o tetracloreto de carbono (He - CCl₄, Ne - CCl₄, Ar - CCl₄, O₂ - CCl₄, D₂O - CCl₄ e ND₃ - CCl₄). Para tanto, usou-se a teoria de Slater que consiste em uma formulação puramente dinâmica, com uma análise vibracional completa dos complexos. O primeiro nível de energia rovibracional (E_{0,0}) e a frequência de vibração (ω_e) utilizadas, foram obtidas via método da Representação da variável discreta e Dunham, respectivamente. Os resultados obtidos tanto pela forma analítica Lennard-Jones (LJ) quanto com a Improved Lennard-Jones (ILJ), mostram que todos os sistemas são estáveis e que o tempo de vida calculado a partir da ILJ é sempre menor quando comparado com o tempo de vida fornecido a partir da LJ. Os resultados do presente artigo, auxiliarão na compreensão de sistemas envolvendo os gases nobres, assim como na compreensão das complicadas interações entre a água e moléculas de interesse biológico.

Palavras-chave: LJ; ILJ; Energia rovibracional; Frequência de vibração.

Abstract

The systems' properties involving noble gases have helped a lot in the development of modeling techniques and standard grades for experimental studies. The objective of this work was to calculate the lifetime of molecular systems formed by helium, neon, argon, dioxygen, deuterated water, deuterated ammonia and carbon tetrachloride (He - CCl₄, Ne - CCl₄, Ar - CCl₄, O₂ - CCl₄, D₂O - CCl₄ and ND₃ - CCl₄). For this, it was used Slater's theory, which consists in an absolutely dynamic formulation, with a complete vibrational analysis of the complexes. The first rovibrational energy level (E_{0,0}) and the vibration frequency (ω_e) used were obtained via Discrete Variable Representation and Dunham methods, respectively. The results obtained by both Lennard-Jones (LJ) and the Improved Lennard-Jones (ILJ) analytical forms show that all systems are stable, and the lifetime calculated from the ILJ is always shorter when compared to the lifetime provided from LJ. The results of this article will help in the understanding of systems involving noble gases, as well as in the understanding of the complicated interactions between water and molecules of biological interest.

Keywords: LJ; ILJ; Rovibrational energy; Vibration frequency.

Resumen

Las propiedades de los sistemas que involucran gases nobles han ayudado mucho en el desarrollo de técnicas de modelado y valores estándar para estudios experimentales. El objetivo de este trabajo fue calcular el tiempo de vida de sistemas moleculares formados por helio, neón, argón, dióxígeno, agua deuterada, amoníaco deuterado y tetracloruro de carbono (He - CCl₄, Ne - CCl₄, Ar - CCl₄, O₂ - CCl₄, D₂O - CCl₄ y ND₃ - CCl₄). Para ello se utilizó la teoría de Slater, que consiste en una formulación puramente dinámica, con un análisis vibracional completa de los complejos. El primer nivel de energía rovibracional (E_{0,0}) y la frecuencia de vibración (ω_e) utilizados se obtuvieron mediante la Representación de Variables Discretas y el método de Dunham, respectivamente. Los resultados obtenidos tanto por la forma analítica de Lennard-Jones (LJ) como por la de Lennard-Jones Mejorada (ILJ) muestran que todos los sistemas son estables y que la vida útil calculada a partir de la ILJ es siempre más breve en comparación con la vida proporcionada por la LJ. Los resultados de este artículo ayudarán en la comprensión de los sistemas que involucran

gases nobres, así como en la comprensión de las complicadas interacciones entre el agua y las moléculas de interés biológico.

Palabras clave: LJ; ILJ; Energía rovibracional; Frecuencia de vibración.

1. Introdução

As propriedades de pequenos aglomerados do tipo van der Waals (vdW - interações fracas e de longo alcance), dos quais os sistemas He - CCl₄, Ne - CCl₄, Ar - CCl₄, O₂ - CCl₄, D₂O - CCl₄ e ND₃ - CCl₄ são protótipos que possuem um interesse especial, pois possibilitam a compreensão das forças que mantêm líquidos e sólidos ligados, bem como a transição de propriedades moleculares para propriedades de metais em massa (Hensel, 1995; Hensel, 1998; Morse, 1986). A caracterização detalhada desses aglomerados é frequentemente obtida através da formulação adequada de campos de força associados a interações intermoleculares não covalentes (Maitland et al., 1983; de Oliveira et al., 2021).

O uso de potenciais simples, mas precisos, que descrevem as interações citadas acima ainda constituem uma questão básica. Ao longo dos tempos, vários potenciais interatômicos foram propostos com o objetivo de descrever a interação entre átomos (Israelachvili, 2015; Bickes & Bernstein, 1977; Hepburn, Scoles & Penco, 1975; Smith et al., 1977; Aziz & Chen, 1977). Em geral, esses modelos alternativos usam uma combinação de funções complicadas e com muitos parâmetros ajustáveis. A função analítica de Lennard-Jones (LJ) (Jones, 1924) ainda é muito utilizada nas simulações de dinâmica molecular de sistemas dominados por interações de van der Waals. No entanto, a função LJ possui algumas deficiências importantes, especialmente em distâncias intermoleculares grandes e curtas (de Oliveira et al., 2021). Alguns anos atrás, através de uma nova função denominada de Improved Lennard-Jones (ILJ) (Pirani et al., 2008), foi possível obter valores experimentais mais precisos para a energia de dissociação ϵ e distância de equilíbrio R_e para vários sistemas moleculares envolvendo os gases nobres. Para tanto, combinou-se experimentos de espalhamento, com a resolução de efeitos de interferência quântica fundamental, espectroscopia e propriedades de transporte. Nesse mesmo artigo, também foi mostrado que a função ILJ fornece um coeficiente de atração de dispersão dipolo-dipolo que se aproxima mais dos valores teóricos e experimentais, do que o coeficiente fornecido pela função LJ.

A caracterização dos eventos de dispersão entre a molécula de tetracloreto de carbono (CCl₄) e outras espécies atômicas e moleculares tem sido motivada por vários motivos (Roncaratti, 2009). Resumidamente, nota-se que a interação entre uma espécie e o CCl₄ é descrita através de uma componente de van der Waals, isso se deve ao fato de que o valor da polarizabilidade do CCl₄ ($\alpha = 10,5 \text{ \AA}^3$) está prevista para ser muito maior do que a de um átomo pesado, como por exemplo ($\alpha = 4,04 \text{ \AA}^3$ para o xenônio) (Kumar, 2002; Olney, Cann, Cooper & Brion, 1997). A molécula de CCl₄ exibe uma estrutura de alta simetria sem momento de dipolo permanente. A interação do complexo H₂O- CCl₄ envolve duas moléculas que geram dois solventes líquidos importantes. Em particular, a dinâmica de água diluída em um solvente hidrofóbico, tal como tetracloreto de carbono, constitui uma excelente oportunidade para estudar as propriedades de rotação da água em fases condensadas sem os efeitos de complicação de ligações de hidrogênio. Por esta razão, esse complexo tem sido objeto de várias investigações teóricas e experimentais (Goodnough et al., 2007; Chang & Dang, 2008; Torii, 2004).

Em particular, a compreensão do complexo H₂O- CCl₄ é muito importante devido sua presença em problemas ambientais, tais como as interações presente em águas subterrâneas contaminadas por solventes orgânicos (Chang & Dang, 1996). Além disso, os potenciais semelhantes entre as moléculas de água em um solvente hidrofóbico e moléculas de água em uma bicamada lipídica, fazem deste um sistema importante para estudo (Price et al., 2000; Xiang & Anderson, 2006).

Para os sistemas Gn- CCl₄ (Gn = He, Ne e Ar), embora a dispersão de indução e atração mostrem uma dependência menor na orientação molecular, a polarizabilidade destas moléculas tem um comportamento quase constante, independente da direção considerada. Portanto, seja na região de forte interação, na região intermediária ou em longas distâncias, os complexos aqui estudados se comportam como sistemas diatômicos, ou seja, a energia de interação pode ser caracterizada por um

potencial radial. Os potenciais utilizados para descrever essas interações foram o LJ e o ILJ.

Nesse trabalho, foi calculado via teoria de Slater (Slater, 1939) o tempo de vida dos complexos He-CCl₄, Ne-CCl₄, Ar-CCl₄, O₂-CCl₄, D₂O-CCl₄ e ND₃-CCl₄. O primeiro nível de energia rovibracional ($E_{0,0}$) e a frequência de vibração (ω_e) de cada complexo, foram obtidos através da Representação da variável discreta -DVR e método de Dunham, respectivamente. Em ambos os métodos foram utilizadas as formas analíticas LJ e ILJ (de Oliveira, Roncaratti, de Macedo & Gargano, 2017).

2. Metodologia

Como se sabe as moléculas estão sujeitas a força repulsiva em menores distâncias e a força atrativa a longas distâncias. O potencial de Lennard-Jones, é uma função matemática simples que descreve este comportamento das moléculas e é dada por:

$$V(R) = \epsilon \left[\left(\frac{R_e}{R} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_e}{R} \right)^6 \right], \quad (1)$$

sendo ϵ a profundidade do poço (energia de dissociação) e R_e a distância internuclear de equilíbrio do sistema molecular. Na expressão 1, o primeiro termo é responsável por descrever o comportamento repulsivo dos complexos, enquanto que o segundo termo caracteriza o comportamento atrativo desses complexos. No entanto, a atração excessiva de longo alcance da LJ pode ser uma forte limitação quando esta função é aplicada, para descrever o comportamento de moléculas grandes, devido a presença de vários centros de interação, que geralmente estão separados por distâncias grandes. Dessa maneira, a ILJ surge como uma função interessante, uma vez que ela pode ser aplicada a sistemas de complexidades crescente e envolve apenas um parâmetro a mais que a LJ. Para os complexos aqui estudados a ILJ fica:

$$V(R) = \epsilon \left[\frac{6}{n(R)-6} \left(\frac{R_e}{R} \right)^{n(R)} - \frac{n(R)}{n(R)-6} \left(\frac{R_e}{R} \right)^6 \right] \quad (2)$$

onde

$$n(R) = \beta + 4 \left(\frac{R}{R_e} \right)^2. \quad (3)$$

Na equação 2, ϵ é a profundidade do potencial e R_e é a distância internuclear de equilíbrio, o primeiro termo descreve a repulsão enquanto o segundo termo descreve a atração. O β que aparece na equação 3 é um parâmetro relacionado à dureza dos dois elementos (átomos) que interagem, para sistemas envolvendo os gases nobres, seu valor experimental é 9.

A dinâmica rovibracional dos complexos aqui estudados foi realizada por duas metodologias diferentes (de Oliveira et al., 2017). A primeira consiste na representação da variável discreta (do inglês *Discrete Variable Representation* - DVR) (Andrianov, 1999; Soares & Costa, 1998). Através dessa abordagem os elementos de matrizes de energia potencial (LJ e ILJ) tornam-se diagonais e os elementos de matrizes do operador energia cinética passam a ser calculados analiticamente. Desse modo, as energias rovibracionais $E_{v,J}$ surgem a partir da solução da equação Schrödinger nuclear (Murrell, 1984). A segunda abordagem utilizada para definir as constantes espectroscópicas, foi o método de Dunham (Dunham, 1932). Essa abordagem faz uso da teoria de perturbação para encontrar uma expressão para a energia rovibracional de um sistema diatômico em termos das derivadas do potencial (LJ e ILJ) na distância internuclear de equilíbrio R_e .

De posse do primeiro nível de energia rovibracional ($E_{0,0}$) e da frequência de vibração (ω_e), pode-se calcular o tempo de vida de cada complexo. O tempo de vida para a decomposição de cada complexo foi calculado utilizando a teoria de Slater (Slater, 1939), que consiste em uma formulação puramente dinâmica, com uma análise vibracional completa dos complexos. A decomposição do sistema molecular ocorre quando a coordenada de interação atinge o limiar de energia de dissociação. Nesse caso, a decomposição é basicamente a frequência da própria vibração e a constante de taxa para este processo é dado por:

$$k(T) = \omega_e e^{\frac{-\varepsilon - E_{0,0}}{RT}}, \quad (4)$$

onde ε representa a energia de dissociação (profundidade da CEP), R é a constante universal dos gases ideais e T é a temperatura absoluta. O tempo de vida para a decomposição é então o recíproco da equação (4), ou seja:

$$\tau(T) = \frac{1}{k(T)} = \frac{1}{\omega_e} e^{\frac{\varepsilon - E_{0,0}}{RT}}. \quad (5)$$

A teoria de Slater é aplicável apenas em regiões de pressão baixa e intermediária, pois na região de pressão alta, as taxas calculadas são muito menores que os valores experimentais. De maneira geral, um complexo é considerado estável, para tempos de vida maiores que 1 pico segundo (ps) (Wolfgang, 1970). Para aplicar a teoria de Slater e calcular o tempo de vida de cada complexo, foram realizadas simulações computacionais através de programas escritos na linguagem Fortran.

3. Resultados e Discussão

As energias rovibracionais e as constantes espectroscópicas para os complexos aqui estudados, foram obtidas via método DVR (de Oliveira et al., 2017). Por motivo de comparações, os autores também calcularam as constantes espectroscópicas pelo método de Dunham. Para realizar a dinâmica rovibracional desses sistemas moleculares, usaram a distância internuclear de equilíbrio (R_e) e energia de dissociação (ε) experimentais [13], esses parâmetros são mostrados na Quadro 1, assim como o primeiro nível de energia rovibracional ($E_{0,0}$) e frequência de vibração (ω_e) de cada sistema obtidos via função ILJ e LJ.

Quadro 1: Distâncias internucleares de equilíbrio em (Å), energias de dissociação em (meV), primeiro nível de energia rovibracional e frequência de vibração em (cm^{-1}) obtidas via função ILJ (LJ em parênteses) para cada sistema molecular (de Oliveira at al., 2017).

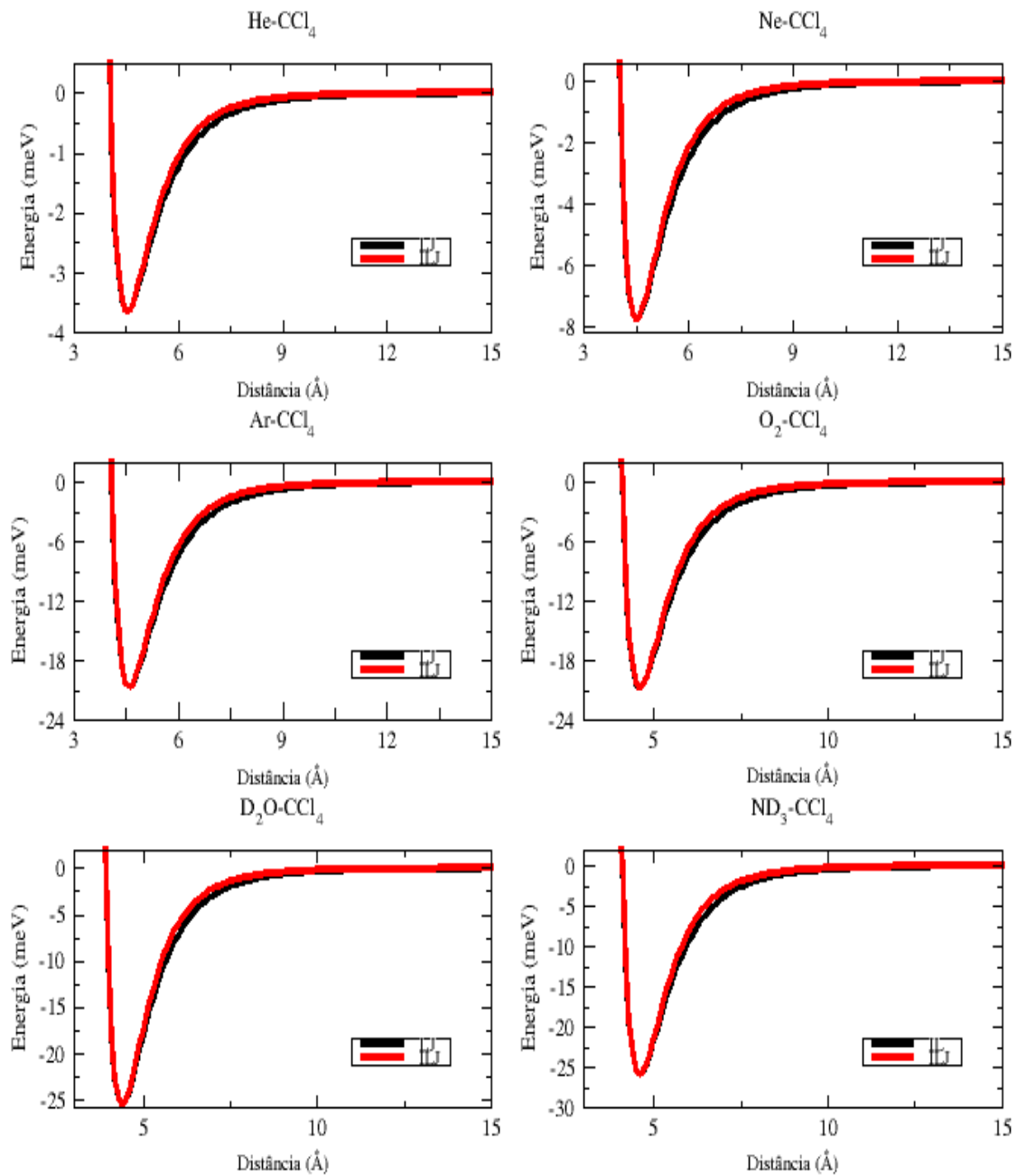
Sistema	R_e	ϵ	$E_{0,0}$	ω_e
He- CCl_4	4,55	3,65	13,4506053 (12,9034003)	30,96 (29,74)
Ne- CCl_4	4,51	7,80	10,1824782 (9,7750956)	21,35 (20,51)
Ar- CCl_4	4,60	20,7	12,5217936 (13,1634306)	25,57 (24,57)
O_2 - CCl_4	4,60	20,8	13,7073162 (12,0253574)	28,05 (26,95)
D_2O - CCl_4	4,40	25,5	19,3294528 (18,561370)	39,70 (38,14)
ND_3 - CCl_4	4,60	26,0	18,6872718 (17,94513080)	38,33 (36,82)

Fonte: Autores (2022).

De posse da R_e e da ϵ é possível construir a curva de energia potencial (CEP) para cada sistema, como pode ser visto na figura 1. Através dessa figura pode-se observar que a ILJ descreve a região assintótica de cada curva de forma diferente da função LJ. Este fato foi usado antes para mostrar as limitações do modelo LJ, de sua inadequação para descrever interações de longo alcance (Pirani at al., 2008). Uma vez que estas duas funções (ILJ e LJ) descrevem essa interação de forma um pouco diferente, os níveis de energias rovibracionais e as constantes espectroscópicas calculados usando essas formas analíticas são divergentes. Tendo o conhecimento da energia de dissociação, do primeiro nível de energia rovibracional e da frequência de vibração (constante espectroscópica ω_e), aplicou-se a teoria de Slater para calcular o tempo de vida de cada complexo. A figura 2, mostra o tempo de vida de cada sistema calculado utilizando os parâmetros fornecidos pela função ILJ e pela função LJ.

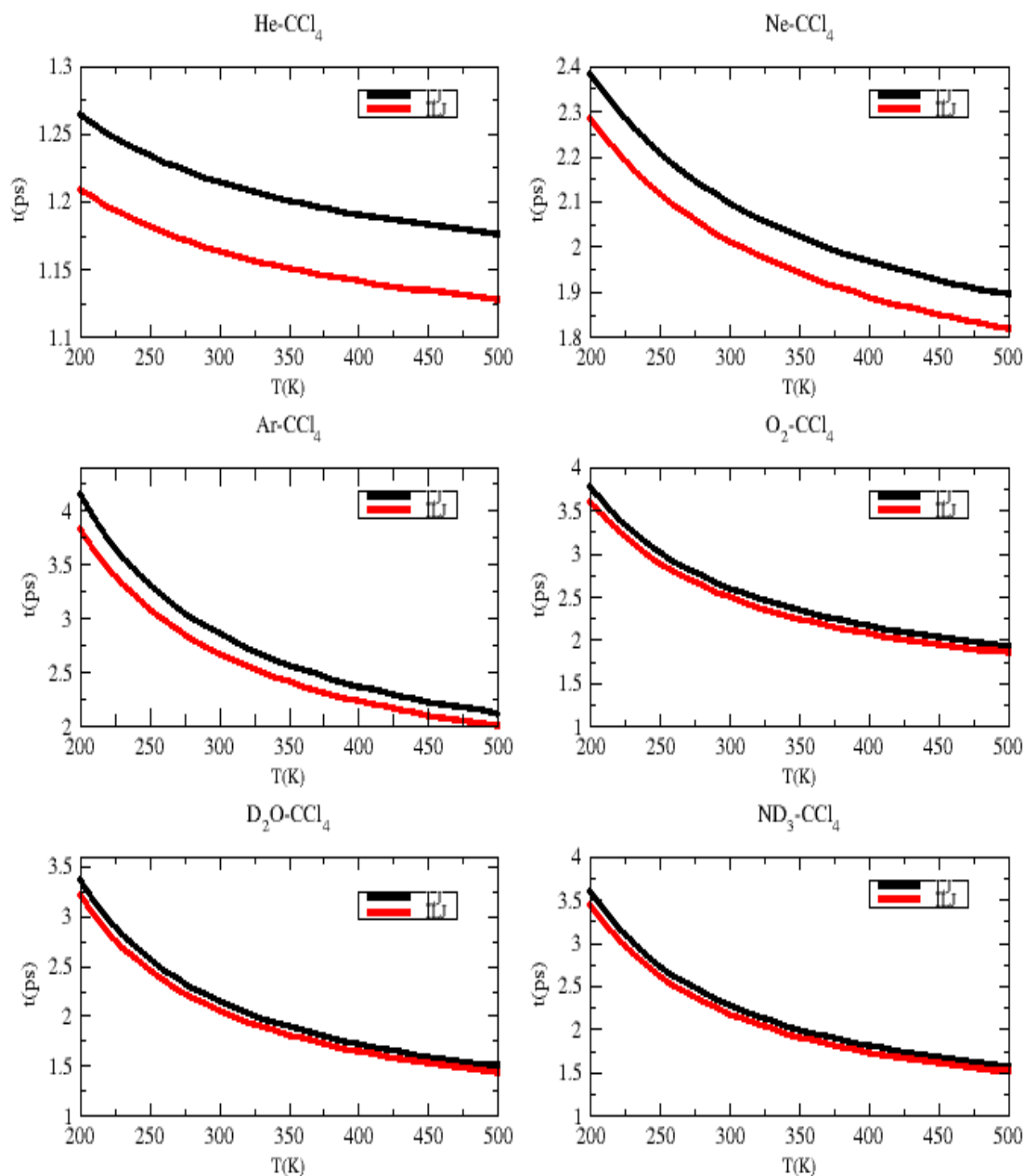
O tempo de vida para a decomposição de um sistema molecular consiste em uma formulação puramente dinâmica, com uma análise vibracional completa dos complexos. Geralmente um complexo é considerado estável, para tempos de vida maiores que 1 pico segundo (ps) e instável para tempos de vida menor que 1 pico segundo [28]. Através da figura 2, pode-se notar que todos os sistemas (He - CCl_4 , Ne - CCl_4 , Ar - CCl_4 , O_2 - CCl_4 , D_2O - CCl_4 e ND_3 - CCl_4) são estáveis e que o tempo de vida calculado a partir da ILJ é sempre menor quando comparado com o tempo de vida fornecido a partir da LJ. Também é possível notar que o tempo de vida calculado pelas funções ILJ e LJ são mais próximos para os sistemas de maior massa reduzida e maior energia de dissociação (Ar - CCl_4 , O_2 - CCl_4 , D_2O - CCl_4 e ND_3 - CCl_4). Para os sistemas de menor massa reduzida e menor energia de dissociação (He - CCl_4 e Ne - CCl_4), o tempo de vida fornecido por cada forma analítica, não estão em boa concordância. Esse fato é justificado pela posição do primeiro nível de energia rovibracional ($E_{0,0}$) na curva de energia potencial, veja referência (de Oliveira at al., 2017). Nesses sistemas, o primeiro nível de energia rovibracional não está na região harmônica da CEP, mais sim na região anarmônica e como já mencionado aqui, a ILJ descreve a região assintótica da CEP de forma diferente da LJ.

Figura 1: Curvas de energias potenciais (CEP's) para cada complexo.



Fonte: Autores (2022).

Figura 2: Tempo de vida para cada complexo, calculados a partir das funções LJ e ILJ.



Fonte: Autores (2022).

4. Considerações Finais

Nesse trabalho, foi determinado pela primeira vez na literatura o tempo de vida para os sistemas moleculares He - CCl₄, Ne - CCl₄, Ar - CCl₄, O₂ - CCl₄, D₂O - CCl₄ e ND₃ - CCl₄. Os resultados obtidos pelas duas funções analíticas (ILJ e LJ), mostraram que todos os sistemas são estáveis e que o tempo de vida calculado a partir da ILJ é sempre menor quando comparado com o tempo de vida fornecido a partir da LJ. Também foi mostrado que o tempo de vida calculado pelas funções ILJ e LJ são mais próximos para os sistemas de maior massa reduzida e maior energia de dissociação (Ar - CCl₄, O₂ - CCl₄, D₂O - CCl₄ e ND₃ - CCl₄). Para os sistemas de menor massa reduzida e menor energia de dissociação (He - CCl₄ e Ne - CCl₄), o tempo de vida fornecido por cada forma analítica, não estão em boa concordância. Esse fato é justificado pela posição

do primeiro nível de energia rovibracional ($E_{0,0}$) na curva de energia potencial. Este estudo pode ajudar na compreensão de sistemas envolvendo os gases nobres e, também, pode auxiliar uma melhor compreensão das complicadas interações entre a água e moléculas de interesse biológico.

Como perspectivas futuras, pretende-se aplicar a mesma metodologia adotada neste trabalho para calcular o tempo de vida de outros complexos de van der Waals, tais como sistemas pela molécula CH_3 com os gases nobres, sistemas envolvendo o NH_3 e os gases nobres, além de complexos formados pela água e amônia com as moléculas de hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e metano. Pretende-se também, calcular as energias eletrônicas desses complexos usando cálculos *ab initio*, isso possibilitará observar o tempo de vida a partir de dados experimentais e teóricos.

experimentais:

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação de Apoio à Pesquisa do Maranhão – FAPEMA, pela bolsa de Iniciação Científica concedida à Maria Elane Aquino dos Santos Paula e ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Maranhão – IFMA, pela oportunidade de desenvolvimento da pesquisa e apoio financeiro em sua publicação.

Referências

- Andrianov, I. (1999). *Simulations of ultrafast photoinduced wave packets dynamics in three dimensions*. Tese (Doutorado). Universitat Berlin.
- Aziz, R. A., & Chen, H. H. (1977). An accurate intermolecular potential for argon. *The Journal of Chemical Physics*, 67(12), 5719-5726.
- Bickes Jr, R. W., & Bernstein, R. B. (1977). The SPF–Dunham expansion for the potential well: A regression model for systematic analysis of differential elastic beam scattering cross sections. *The Journal of Chemical Physics*, 66(6), 2408-2420.
- Chang, T. M., & Dang, L. X. (2008). Computational studies of liquid water and diluted water in carbon tetrachloride. *The Journal of Physical Chemistry A*, 112(8), 1694-1700.
- Chang, T. M., & Dang, L. X. (1996). Molecular dynamics simulations of CCl_4 – H_2O liquid–liquid interface with polarizable potential models. *The Journal of chemical physics*, 104(17), 6772-6783.
- de Oliveira, R. M., Machado de Macedo, L. G., da Cunha, T. F., Pirani, F., & Gargano, R. (2021). A Spectroscopic Validation of the Improved Lennard–Jones Model. *Molecules*, 26(13), 3906.
- de Oliveira, R. M., Roncaratti, L. F., de Macedo, L. G. M., & Gargano, R. (2017). The interaction of CCl_4 with Ng (Ng= He, Ne, Ar), O_2 , D_2O and ND_3 : rovibrational energies, spectroscopic constants and theoretical calculations. *Journal of molecular modeling*, 23(3), 87.
- Dunham, J. L. (1932). The energy levels of a rotating vibrator. *Physical Review*, 41(6), 721.
- Goodnough, J. A., Goodrich, L., & Farrar, T. C. (2007). Dynamics of dilute water in carbon tetrachloride. *The Journal of Physical Chemistry A*, 111(28), 6146-6150.
- Hensel, F. (1998). The liquid–vapour phase transition in fluid metals. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 356(1735), 97-117.
- Hensel, F. (1995). The liquid–vapour phase transition in fluid mercury. *Advances in Physics*, 44(1), 3-19.
- Hepburn, J., Scoles, G., & Penco, R. (1975). A simple but reliable method for the prediction of intermolecular potentials. *Chemical Physics Letters*, 36(4), 451-456.
- Israelachvili, J. N. (2015). *Intermolecular and surface forces*. Academic press.
- Jones L. E. 1924. On the determination of molecular fields. —II. From the equation of state of a gas. *Proc. R. Soc. Lond. A* 106, 463–477.
- Kumar, A. (2002). Reliable isotropic dipole properties and dispersion energy coefficients for CCl_4 . *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 591(1-3), 91-99.
- Maitland, G., Rigby, M., Smith, E., Wakeham, W., & Henderson, D. (1983). Intermolecular forces: their origin and determination. *Physics Today*, 36(4), 57.
- Morse, M. D. (1986). Clusters of transition-metal atoms. *Chemical Reviews*, 86(6), 1049-1109.
- Murrell, J. N. (1984). *Molecular potential energy functions*. J. Wiley.

Olney, T. N., Cann, N. M., Cooper, G., & Brion, C. E. (1997). Absolute scale determination for photoabsorption spectra and the calculation of molecular properties using dipole sum-rules. *Chemical physics*, 223(1), 59-98.

Pirani, F., Brizi, S., Roncaratti, L. F., Casavecchia, P., Cappelletti, D., & Vecchiocattivi, F. (2008). 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*, 10(36), 5489-5503.

Price, W. S., Ide, H., & Arata, Y. (2000). Translational and rotational motion of isolated water molecules in nitromethane studied using ^{17}O NMR. *The Journal of Chemical Physics*, 113(9), 3686-3689.

Roncaratti, L. R. (2009). *Quantum effects in molecular scattering experiments: Characterization of the interaction in weakly bound complexes*. Universita Degli di Perugia.

Slater, N. B. (1939, January). The rates of unimolecular reactions in gases. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* (Vol. 35, No. 1, pp. 56-69). Cambridge University Press.

Smith, K. M., Rulis, A. M., Scoles, G., Aziz, R. A., & Nain, V. (1977). Intermolecular forces in mixtures of helium with the heavier noble gases. *The Journal of Chemical Physics*, 67(1), 152-163.

Soares Neto, J. J., & Costa, L. S. (1998). Numerical generation of optimized discrete variable representations. *Brazilian journal of physics*, 28(1), 1-11.

Wolfgang, R. (1970). Energy and chemical reaction. II. Intermediate complexes vs. direct mechanisms. *Accounts of Chemical Research*, 3(2), 48-54.

Torii, H. (2004). Atomic quadrupolar effect in the methanol- CCl_4 and water- CCl_4 intermolecular interactions. *Chemical physics letters*, 393(1-3), 153-158.

Xiang, T. X., & Anderson, B. D. (2006). Conformational structure, dynamics, and solvation energies of small alanine peptides in water and carbon tetrachloride. *Journal of pharmaceutical sciences*, 95(6), 1269-1287.