P- ISSN 1991-8941 , E-ISSN 2706-6703 (JUAPS) مجلة جامعة الانبار للعلوم الصرفة Open Access
2011 ,(5), (1) :44-60

دراسة عملية ونظرية للسلوك الامتزازي وللخصائص الكهربائية لبعض معوضات
دراسة العلاقة بين ترددات الاهتزاز ورتبة التآصر لأواصر CH و CC لجزيئة الكورونين وجذورها الأيونية الموجبة والسالبة باستخدام حسابات مكانيك الكم

رحاب ماجد كبة   منال عبيد   مثنى شنشل

جامعة بغداد – كلية العلوم

معلومات البحث:
تاريخ التسليم: 2010/10/17
تاريخ القبول: 2011/2/10
تاريخ النشر: 14/ 6 / 2012
DOI: 10.37652/juaps.2011.15457

الكلمات المفتاحية:
ترددات الاهتزاز ،
رتبة التآصر ،
اصرة CH اصرة CC ،
الكورونين ،
حسابات مكانيك الكم.

الخلاصة:
تم حساب ترددات الاهتزاز و شدد امتصاص الأشعة تحت الحمراء و الإحداثيات المتعامدة لجذري أيون الكورونين الموجب الشحنة والسالب الشحنة، مستخدمين حسابات ميكانيك الكم وفق نموذجي الحساب التقريبي MINDO/3 وPM3 و نموذج الحساب التام (B3LYP/6-311G)) DFT). و قد مكنت الحسابات من التعريف الصحيح لجميع ترددات الاهتزاز المقاسة تجريبيا للايون الموجب لهذه الجزيئة، و بالصيغتين التماثلية و التكافؤية. كما أمكن التنبؤ بجميع ترددات الاهتزاز للايون السالب للجزيئة نفسها. و بناء على هذه التعريفات فقد أمكن إجراء المقارنة بين ترددات الاهتزاز للايونين وعلى وفق التماثل المحسوب لهما (D2h)، والجزيئة المتعادلة ذات التماثل (D6h). تبين أيضا أن تردد مط الآصرة C-H يعتمد مباشرة مع كثافة الالكترونات نوع σ لذرات الكربون العائدة لها، ولايصح لاواصر CC.

المقدمة:

جرت محاولات عديدة لقياس طيف الأشعة تحت الحمراء لجزيئة الكورونين تجريبيا باستخدام تقنية الأنسجة الجزيئية المعزولة Isolated matrix من Szespanski & Vala عام [1] (1993)، ثم (Joblin, Hendcourt & Leger) عام [2] (1994) أعقبهم (Hudgins & Sandford) عام (1998)[3]. أما دراسة الطيف الاهتزازي للجزيئة نظريا فقد قام بها Langhoff [4] . وكذلك (Fleischer & Pulay) [5] اللذين قاما بحساب طيف رامان للجزيئة المتعدلة باستخدام حسابات دوال الكثافة DFT عند عناصر القاعدة (B3LYP/6-31G) عام (1998).

وبدورنا قمنا بحساب ترددات الاهتزاز لجزيئة الكورونين وللايونيها الموجب و السالب باستخدام برنامج (Gauss03) [5] على وفق حسابات MINDO/3 وPM3 التقريبية و(DFT)(B3LYP/6-311G) التامة و بعدد (3N-6) ، و قورنت النتائج مع القيم المقاسة تجريبيا والمحسوبة نظريا [6].

* Corresponding author at: Baghdad University - College of Science;
ORCID: https://orcid.org/0000-0001-5859-6212 .Mobil:777777
E-mail address:

النتائج المناقشة

تم حساب القيم الهندسية (أطوال وزوايا التآصر) للجريئة باستخدام برامج الحساب MINDO/3 و PM3 وحسابات (DFT)(B3LYP/6-311G) جدول (1) حيث تم اعتماد طريقة IUPAC في ترقيم الذرات شكل (1).

الكورونين جزيئة مستوية لها طيف بسيط رغم كونها جزيئة كبيرة بسبب التماثل العالي لها D6h، وتبعا لتماثلها تم استخراج العدد الكلي للأصناف التماثلية (rtot.) وعدد التماثلات غير القابلة للاختزال irreducible representation كما يأتي:

rtot. = 3N =3×36 = 108 = 6A1g + 6A2g + 6B1u + 6B2u + 12E1u + 12E2g +2A1u + 4A2u + 4B1g + 2B2g + 6 E1g + 6 E2u

rg = rrot. (A2g(Rz) + E1g(Rx, Ry)) + rtran. (A2u(Tz) + E1u(Tx, Ty))

rvib = rtot. - rg = 6A1g + 5A2g + 6B1u + 6B2u + 11E1u + 12E2g +2A1u + 3A2u + 4B1g + 2B2g + 5E1g + 6 E2u

تصنف هذه التماثلات إلى 69 نمطا اهتزازيا (2N-3 = 69) يقع عند مستوى سطح الجزيئة ويمتلك عملية الانعكاس (+σh) في جدول القيم الذاتية, و33 نمطا (N-3 = 33) اهتزازيا يقع خارج مستوى سطح الجزيئة و يمتلك عملية الانعكاس (-σh) في جدول القيم الذاتية (شكل-2).

Γip = 6A1g + 5A2g + 6B1u + 6B2u + 11E1u + 12E2g

Γop = 2A1u + 3A2u + 4B1g + 2B2g + 5E1g + 6 E2u

كما و يستدل من جدول القيم الذاتية، على امتلاك الجزيئة 40 نمطا اهتزازيا (5E1g, 12E2g, 6A1g)، فعالا في طيف رامان و25 نمطا فعالا في طيف الأشعة تحت الحمراء (11E1u, 3A2u)، و37 نمطا غير فعال في طيف رامان أو طيف الأشعة تحت الحمراء (2B2g, 4B1g, 2A1u, 6B2u, 6B1u, 5A2g). و يبين الشكل (2) أنموذج من أنماط الحركة الاهتزازية لجزيئة الكورونين المتعادلة.

تصنيف ترددات الاهتزاز

أ- ترددات الأنماط الاهتزازية الواقعة عند مستوى سطح الجزيئة.

و تشتمل 69 نمطا 11E1u, 6B2u, 6B1u, 5A2g, (12E2g, 6A1g) اهتزازيا، 30 منها فقط (12E2g, 6A1g) فعالة في طيف رامان و 22 نمطا (11E1u) فعالا في طيف الاشعة تحت الحمراء، و 22 نمطا (6B2u, 6B1u, 5A2g) غير فعال في طيف رامان او طيف الاشعة تحت الحمراء. وقد تم تصنيفها بالشكل الآتي:

1- ترددات مط الاصرة CH

وعددها 12 ترددا بقدر عدد اواصر CH. وتتراوح قيم ترددات بين (3055-3031) سم-1 . جدول (2) ويلاحظ فيها العلاقة الآتية:

νsym (CH str.)(3055 cm-1) >
νasym (CH str.)(3034 cm-1)

2- ترددات المط الحلقية.

و تشتمل على 23 ترددا (NC-1) حيث NC عدد ذرات الكاربون في الجزيئة. تتراوح القيم العددية لتردداتها بين (1352-1656) سم- 1. جدول (2) و يلاحظ فيها ان:

νsym (CC str.)(1639 cm-1) > νasym (CC str.)(1584 cm-1)

3- ترددات انحناء الآصرة CH عند مستوى سطح الجزيئة (δCH)

وعددها 12 ترددا بقدر عدد اواصر CH. و تتراوح القيم العددية لتردداتها بين (1177-1262) سم-1 جدول (2)، وتكون فيها قيم ترددات الانماط غير المتماثلة اعلى منها للانماط المتماثلة اي ان:

νasym (δCH) (1196 cm-1) <
νsym (δCH) (1262cm-1)

4- ترددات انحناء الحلقات العطرية عند مستوى سطح الجزيئة (δCCC)

وعددها 22 ترددا تتراوح قيمها بين (376-1055) سم-1, جدول (2)، و يلاحظ فيها:

νasym (δCCC) (690 cm-1) <
νsym (δCCC) (1055 cm-1)

ب- ترددات الأنماط الاهتزازية الواقعة خارج مستوى سطح الجزيئة.

و تشتمل على 30 نمطا اهتزازيا منها 10 انماط (5E1g) فعالة في طيف رامان و3 انماط (3A2u) فعالة في طيف الاشعة تحت الحمراء و20 نمطا (6E2u, 2B2g, 4B1g, 2Au) غير فعال في طيف رامان ولا طيف الاشعة تحت الحمراء صنفت بالشكل الآتي:

1- ترددات انحناء الآصرة CH خارج مستوى سطح الجزيئة (γCH).

وعددها اثناعشر ترددا بقدر عدد اواصر CH تتمركز متجهات الازاحة فيها عند ذرات الهيدروجين لاواصر CH, تتراوح قيمها بين (-1004 726) سم-1 .

2- ترددات انحناء الحلقات العطرية خارج مستوى سطح الجزيئة (γCC) .

وعددها احدى وعشرون ترددا (NC-3), تتراوح قيمها بين (90 -745) سم-1.

ترددات الاهتزاز لجذر الكورونين السالب (C24H12)

تم حساب ترددات الاهتزاز وشدة امتصاص الاشعة تحت الحمراء لجذر الكورونين السالب على وفق طريقة الحساب التقريبية MINDO/3 و طريقة تاحساب التام (حسابات DFT عند عناصر القاعدة B3LYP/6-311G) كما تم الحصول على اطوال الاواصر للجزيئة وصفاتها الفيزيائية جدول (3). وقد خلت حساباتنا من المقارنة مع القيم التجريبية او النظرية لافتقار الادبيات اليها.

جذر الكورونين السالب جزيئة مستوية تمتلك الشكل التماثلي D2h. تم استخراج العدد الكلي للاصناف التماثلية (rtot.) المحسوبة مع عدد التماثلات غير القابلة للاختزال كما يأتي:

$$\Gamma tot. = 3N = 3\times36 = 108 = 18Ag + 8B1g + 10B2g + 18B3g + 8Au + 18B1u + 18B2u + 10B3u$$

$$\Gamma vib = 3N-6 = (3\times36)-6 = 102 = 18Ag + 7B1g + 9B2g + 17B3g + 8Au + 17B1u + 17B2u + 9B3u$$

$$\Gamma ip = 2N-3 = (2 \times 36 - 3) = 69 = 18Ag + 17B3g + 17B1u + 17B2u$$

$$\Gamma op = N-3 = 36-3 = 33 = 7B1g + 9B2g + 8Au + 9B3u$$

تصنيف ترددات الاهتزاز لجذر الكورونين السالب

أ- ترددات الأنماط الاهتزازية الواقعة عند مستوى سطح الجزيئة.

1- ترددات مط الاصرة CH

و تتراوح قيم ترددا تها المحسوبة على وفق طريقة الحساب (DFT)(B3LYP/6-311G) بين (3027-2990) سم-1 وشدة امتصاصها بين (352-0.00) كم مول-1 و بالاطلاع على جدول (4) يمكن التوصل الى ان:

νsym (CH str.) (3027 cm-1) >

νasym (CH str.) (3023 cm-1)

2- ترددات المط الحلقية.

وتتراوح قيم ترددا تها المحسوبة على وفق طريقة الحساب (DFT)(B3LYP/6-311G) بين (1651-1349) سم-1 ، وشدة امتصاصها بين (450.6-0.00) كم مول-1 ، و بالاطلاع على جدول (4) يمكن التوصل الى ان:

νsym (CC str.) (1651 cm-1) >

νasym (CC str.) (1632 cm-1)

3- ترددات انحناء الآصرة CH عند مستوى سطح الجزيئة.

و تتراوح قيم ترددا تها الناتجة من حسابات (DFT)(B3LYP/6-311G) بين (1285-1045) سم-1 وشدة امتصاصها بين (357-0.00) كم مول-1 و بالإطلاع على جدول (4) نستنتج أن:

νasym (δ CH) (1245 cm-1) >

νsym (δ CH) (1207 cm-1)

4- ترددات انحناء الحلقات العطرية عند مستوى سطح الجزيئة.

The in-plane (δCCC) vibrations

و تتراوح قيم ترددا تها المحسوبة على وفق طريقة الحساب (DFT)(B3LYP/6-311G) بين (1168-131) سم-1 وشدة امتصاصها بين (31.45-0.00) كم مول-1، جدول (4) حيث ان:

νasym (δCCC) (1054 cm-1) >

νsym (δCCC) (1047 cm-1)

ب- ترددات الأنماط الاهتزازية الواقعة خارج مستوى سطح الجزيئة.

1- ترددات انحناء الاصرة CH خارج مستوى سطح الجزيئة (γCH)

تتراوح قيم ترددا تها المحسوبة على وفق طريقة الحساب (DFT)(B3LYP/6-311G) بين (1031-806) سم-1 وشدة امتصاصها بين (192.8-0.00) كم مول-1

2- ترددات انحناء الحلقات العطرية خارج مستوى سطح الجزيئة (γCC)

وتتراوح قيم ترددا تها المحسوبة على وفق طريقة (DFT)(B3LYP/6-311G) بين (713-87) سم-1 وشدة امتصاصها بين (32.45-0.00) كم مول-1.

ترددات الاهتزاز لجذر الكورونين الموجب +.(C24H12).

قام هندكوت Hendcourt عام (1994)[8] والمندولا Allamandola عام (1995)[9] بقياس طيف الاشعة تحت الحمراء لجذر الكورونين الموجب تجريبيا باستخدام تقنية الانسجة الجزيئية

المعزولة Isolated matrix ولم يرد في الادبيات اي دراسة نظرية الطيف الاهتزازي للأيون الموجب لجزيئة الكورونين.

لذا تم حساب الشكل الهندسي التوازني باستخدام برنامج MINDO/3 لغرض المقارنة مع مقايسة القيم العددية العائدة للتردداتها الاهتزازية. وتم اعتماد حسابات (DFT)(B3LYP/6-311G) بصورة رئيسة للحصول على ترددات الاهتزاز التي تم تصنيفها تماثليا وتكافؤيا. كما تمت مقارنة النتائج بالقيم المقاسة تجريبيا لالمندولا [10].

جذر الكورونين الموجب جزيئة مستوية planar تمتلك الشكل التماثلي D2h, و لها 102 من درجات الحرية الاهتزازية حسب العلاقة (3N-6) تم استخراجها بالاستعانة بجدول القيم الذاتية كما يأتي:

Γtot. = 3N =3×36 = 108 = 18Ag + 8B1g + 10B2g + 18B3g + 8Au + 18B1u + 18B2u + 10B3u

Γvib = 3N-6 =(3×36)-6 = 102 = 18Ag + 7B1g + 9B2g + 17B3g + 8Au + 17B1u + 17B2u + 9B3u

Γip = 2N-3 =(2 × 36 - 3) = 69 = 18Ag + 17B3g + 17B1u + 17B2u

Γop = N-3 = 36-3 = 33 = 7B1g + 9B2g + 8Au + 9B3u

تصنيف ترددات الاهتزاز

أ- ترددات الأنماط الاهتزازية الواقعة عند مستوى سطح الجزيئة.

و تشتمل على تسعة وستين نمطا اهتزازيا. منها 53 نمطا (18Ag, 17B3g) فعالا في طيف رامان. و33 نمطا (17B2u, 17B1u) فعالا في طيف الاشعة تحت الحمراء تم تصنيفها كالآتي:

1- ترددات مط الآصرة CH

The CH stretching vibrations وتتراوح قيم ترددتها الناتجة من حسابات (DFT)(B3LYP/6-311G) بين (3076-3055) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.00-37.24) كم مول-1, وبالاطلاع على جدول (6) يمكن التوصل الى أن:

νsym (CH str.) (3076 cm-1) >

νasym (CH str.) (3075 cm-1)

2- ترددات المط الحلقية.

و تتراوح قيم ترددتها الناتجة من حسابات (DFT)(B3LYP/6-311G) بين (1639-1328) سم-1 وشدة امتصاصها بين (363- 0.00) كم مول-1, كما ويتضح من جدول (6) ان:

νsym (CC str.) (1584 cm-1) >

νasym (CC str.) (1561 cm-1)

3- ترددات انحناء الآصرة CH عند مستوى سطح الجزيئة (δCH).

و تتراوح قيم ترددتها الناتجة من حسابات (DFT)(B3LYP/6-311G) بين (1272-1105) سم-1 وشدة امتصاصها بين (80.7- 0.00) كم مول-1, وبالاطلاع على جدول (6) نستنتج ان :

νasym (δCH) (1260 cm-1) > νsym (δCH) (1229 cm-1)

4- ترددات انحناء الحلقات العطرية عند مستوى سطح الجزيئة (δCCC).

و تتراوح قيم ترددتها الناتجة من حسابات (DFT)(B3LYP/6-311G) بين (1144-336) سم-1 وشدة امتصاصها بين (89.0- 0.00) كم مول-1، جدول (6) حيث ان:

νasym (δCCC) (1084 cm-1) >

νsym (δCCC) (1043 cm-1)

ب- ترددات الانماط الاهتزازية الواقعة خارج مستوى سطح الجزيئة.

وعددها 33 نمطا اهتزازيا (7B1g, 9B2g, 8Au, 9B3u) تم تصنيفها الى:

1- ترددات انحناء الآصرة CH خارج مستوى سطح الجزيئة (γCH) .

و تتراوح قيم ترددتها الناتجة من حسابات (DFT)(B3LYP/6-311G) بين (961-744) سم-1 وشدة امتصاصها بين (204.6- 0.00) كم مول-1

2- ترددات انحناء الحلقات العطرية خارج مستوى سطح الجزيئة (γCC)

و تتراوح قيم ترددتها الناتجة حسابات (DFT)(B3LYP/6-311G فتتراوح بين (86-771) سم−1, وشدة امتصاصها بين (-34.33 0.00) كم مول−1

علاقات مشتركة:

ترددات الانماط الاهتزازية الواقعة عند مستوى سطح الجزيئة.

1- ترددات مط الاصرة CHعند مقارنة ترددات الاهتزاز المتماثلة لمط الآصرة CH المحسوبة على وفق طريقة الحساب-DFT (B3LYP/6 311G لجزيئة الكورونين المتعادلة وايونيها السالب والموجب لوحظت العلاقة الآتية:

νsym CH str. $(C_{24}H_{12})^{\cdot+}$ >

νsym CH str. $(C_{24}H_{12})$ >

νsym CH str. $(C_{24}H_{12})^{\cdot-}$

و تتبع الكثافة الالكترونية لالكترونات الآصرة سكما المحسوبة لذرات الكاربون المساهمة في تلك الآصرة للاصناف الثلاث نفس التسلسل السابق :

σ CH str. $(C_{24}H_{12})^{\cdot+}$ > σ CH str. $(C_{24}H_{12})$ > σ CH str. $(C_{24}H_{12})^{\cdot-}$

و يوضح الرسم البياني (4) العلاقة الطردية بين ترددات الاهتزاز و الكثافة الالكترونية لالكترونات الآصرة سكما لأصناف الجريئة الثلاث.

2- ترددات المط الحلقية

عند دراسة ترددات المط الحلقية المتماثلة العائدة لجزيئة الكورونين وايونيها السالب والموجب تم ملاحظة العلاقة الآتية :

νsym CC str. $(C_{24}H_{12})$ >

νsym CC str. $(C_{24}H_{12})^{\cdot-}$ >

νsym CC str. $(C_{24}H_{12})^{\cdot+}$

نستنتج من ذلك عدم وجود علاقة واضحة بين ترددات الاهتزاز ورتبة التآصر لأواصر (CC) المزدوجة منها والمنفردة العائدة للأصناف الثلاثة (متعادل وسالب وموجب) لجزيئة الكورونين وهو نفس ما تم التوصل إليه لجزيئة الكورانيولين [10] , وذلك يدعم اعتقادنا بان السبب في تباين العلاقات إنما يعود إلى تغيير الشكل التماثلي للجزيئة عند التأين حيث تتغير مجموعة النقطة لجزيئة الكورونين من الشكل التماثلي (D6h) إلى الشكل التماثلي (D2h) عند التأين. وتفتقر جزيئة البريلين هكذا علاقات متباينة لاحتفاظها بشكلها التماثلي (D2h) عند التأين [11].

ترددات الانماط الاهتزازية الواقعة خارج مستوى سطح الجزيئة.

ترددات انحناء الآصرة CH خارج مستوى سطح الجزيئة.(γCH)

γCH $(C_{24}H_{12})$ >

γCH $(C_{24}H_{12})^{\cdot-}$ >

γCH $(C_{24}H_{12})^{\cdot+}$

ترددات الانماط الاهتزازية الواقعة عند مستوى سطح الجزيئة.

ترددات انحناء الآصرة CH عند مستوى سطح الجزيئة. (δCH)

عند مستوى سطح الجزيئة ولاصناف CHتتبع ترددات الانحناء للآصرة جزيئة الكورونين الثلاثة (متعادل وسالب وموجب) التسلسل الآتي:

δsym CH $(C_{24}H_{12})^{\cdot+}$ >

δsym CH $(C_{24}H_{12})$ >

δsym CH $(C_{24}H_{12})^{\cdot-}$

δasym CH $(C_{24}H_{12})^{\cdot-}$ =

δasym CH $(C_{24}H_{12})^{\cdot+}$ >

δ asym CH $(C_{24}H_{12})$

2- ترددات انحناء الحلقات العطرية عند مستوى سطح الجزيئة. (δCCC)

تتبع ترددات انحناء الحلقات العطرية المتماثلة لاصناف الجزيئة الثلاث التسلسل الآتي:

δsym CCC $(C_{24}H_{12})$ >

δsym CCC $(C_{24}H_{12})^{\cdot-}$ >

δsym CCC $(C_{24}H_{12})^{\cdot+}$

ترددات انحناء الحلقات العطرية خارج مستوى سطح الجزيئة.

γCC $(C_{24}H_{12})$ >

γCC $(C_{24}H_{12})^{\cdot+}$ >

γCC $(C_{24}H_{12})^{\cdot-}$

الاستنتاجات:

أعطت نتائج الحساب لترددات الاهتزاز للجزيئة المتعادلة وفق نظرية دوال الكثافة الاساسية DFT وطريقة الحساب شبه التجريبية MINDO/3 المقيسة القيم الاقرب للقيم التجريبية المقاسة من طريقة الحساب شبه التجريبية PM3. و يؤمل أن تكون نتائج الحساب لترددات الاهتزاز وشدة امتصاصها للجذر الموجب والجذر السالب مثل ذلك، ولهذه الترددات أهمية كبيرة لافتراض عائدية الحزم المنبعثة من الفضاء للجزيئات أمثالها، ولعدم ورود القياسات التجريبية لها في الادبيات. وأشارت محصلة النتائج الى أن اكتساب الكترون في الجذر السالب وفقدان الكترون في الجذر الموجب ادى الى تغير التماثل من D6h في الجزيئة المتعادلة الى D2h في الجذرين الموجب والسالب أتبعه تغير في أطوال الاواصر ورتبها وثوابت القوى وفي العلاقات بين ترددات الاهتزاز للاصناف الثلاثة. كذلك لوحظ وجود علاقة طردية بين حرارة تكوين و ترددات الاهتزاز فالجذر السالب يمتلك أقل حرارة تكوين وأقل ترددات مط للاصرة CH، والجذر الموجب يمتلك أكبر حرارة تكوين وأكبر ترددات مط للاصرة CH، والجزيئة المتعادلة تمتلك قيم لحرارة التكوين وترددات مط للاصرة CH وسط بين قيمها للجذر الموجب وللجذر السالب. ويتوقع لهذه النتائج أن يكون لها أهمية ومساهمة في اغناء المعرفة العلمية للمركبات الاروماتية العضوية متعددة الحلقات، Poly Aromatic Hydrocarbons (PAHs).

المصادر

1- Szczepanski J. and Vala M., (1993). J. Astrophys.;414: 646.

2- Joblin C., Legar P., Legar A., D'Hendcourt L. and Defourneau D., (1994). Astronomy and Astrophys.; 281: 923.

3- Hudgins M. and Sandford, A. (1998). Infrared Spectroscopy of Matrix Isolated Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, 2PAH Containing Firear More Ring. J. Phys. Chem. ;A102:344-352.

4- Langhoff, S.R. Theoretical Infrared Spectra for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, Neutral, Cations and Anions. J. Phys.Chem. ;100:2819, (1996).

5- M.J. Frish, (2003). Gaussian 03, RevisionB.03, Gaussian Pittsburgh, PA.

6- U. Fleischer and P. Pulay, J. Raman Spectrosc.29,473-481, (1999).

7- 16- a)- Kubba, R.M., Al-Ani R.L. and Shanshal, M. (2005). Carbon σ-Electron Densities and C-H Stretching Vibration Frequencies of Phenanthrene. ***Z. Naturforsch,* 60a, 165-170**.: b)- Kubba, R.M., Al-Ani R.R., and Shanshal, M. (2005). Frequencies and Normal Modes of Vibration of Benz(a)anthracene Radical Ions. Z. Naturforsch.; 60a:158-164.: c)- Kubba R.M., S.H. Rida and A.H. Hanoon, (2005). Vibration Frequencies, Normal Coordinates and IR Absorption Intensities of 1-; 1,2-; 1,3- and 1,2,3- Methylene Cyclobutane Dirivatives, Z. Naturforsch. ;60a: 411-418. :d)- Kubba R.M., Rida S.H. and Hanoon A.H., (2005). Geometry, Vibration Frequencies, Normal Coordinates and IR Absorption Intensities of 6-Radialine. Z. Naturforsch. ;60a: 419-423. :e)- Kubba R.M., (2005). Aromatic C-H Bond Rupture; ADensity Functional, B3LYP, Study. Z. Naturforsch. ;60a: 861-862. :f)- Abdullah H.H., Kubba R.M., and Shanshal M., (2003). Vibration Frequencies Shifts of Naphthalene and Anthracene as Caused by Different Molecular Charge. Z. Naturforsch. ;58a: 645-655.

8- E. Lewars, (2004). COMPUTATIONAL CHEMISTRY "Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics".,Chemistry Department, Trent University, Peterborough, Ontario, Canada.

9- Hendcourt L. and Legar, A. (1994)."In The First Symposium on the Infrared Cirrus and Diffuse Interstellar Clouds", ASP Conference Series Vol.58, R.M. Cutri, W.B. Latter, Astronomical Soc. of the Picific, San Francisco.

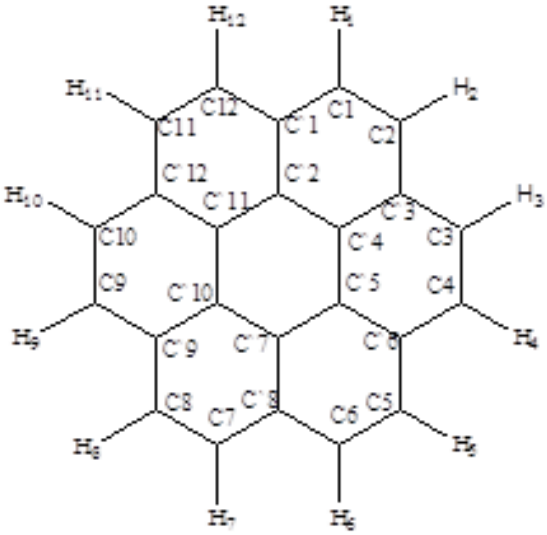
10- Hudgins M. and Allamandola, L. Infrared Spectroscopy of Matrix Isolated Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, Cations.2. The Members of the Thermodynamically Anvailable Series Through Corannulene. J. Phys. Chem. 99, 3033-3046, (1995).

11- M. Al-Deleimy, (2005). Correlation Study of Vibration Frequencies with Bond Order of CC Bonds in Polycyclic Aromatic: Perylene, coranulene and Coronene and Their positive and Negative Radical Ions Using Quantum Mechanical Calculations., M.Sc. Thesis, College of Science, Baghdad University.

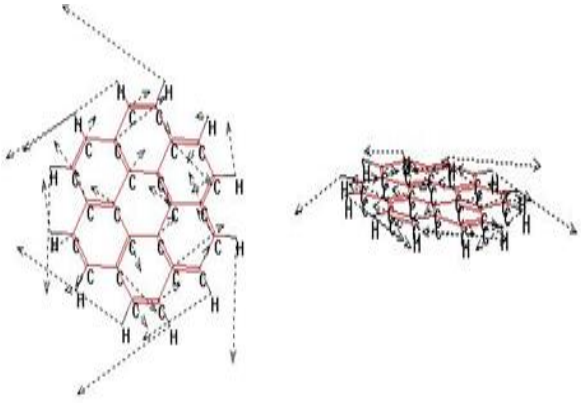
Bond length (Å) & Bond angles (deg.)	this work MINDO/3	this work DFT (B3LYP/6-311G)	this work PM3
$C_1C`_1$	1.450	1.425	1.425
C_1C_2	1.373	1.373	1.365
$C`_1C`_2$	1.446	1.423	1.401
$C`_2C`_4$	1.475	1.429	1.427
H_1C_1	1.107	1.082	1.096
H_2C_2	1.107	1.082	1.096
$<C`_1C_1C_2$	122.2	121.2	120.9
$<C_1C`_1C`_2$	117.7	118.7	119.0
$<C_1C`_1C_{12}$	124.5	122.4	121.8
$<C_1C_2C`_3$	122.7	121.2	120.9
$<C`_1C`_2C`_4$	119.9	120.0	120.0
$<C`_1C`_2C`_1$	119.9	120.0	120.0

شكل (1) ترميز الذرات حسب نظام IUPAC

In-plane (ν_{57}, E_1u, 1170)



Out of plane (ν_{35}, E_1g, 867)



(شكل–2) أنموذج من أنماط الحركة الاهتزازية لجزيئة الكورونين المتعادلة.

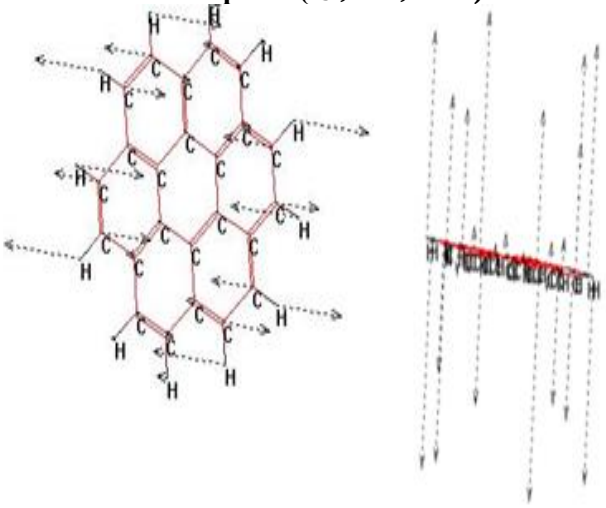


Table (1): Calculated geometry for Coronene molecule.

P- ISSN 1991-8941 , E-ISSN 2706-6703 (*JUAPS*) مجلة جامعة الانبار للعلوم الصرفة Open Access
2011 ,(5), (1) :44-60

ν_{49}	ring (CC str.)	1706	1812	1808	------	1655	10.9176
ν_{50}	ring (CC str.)	1706	1812	1808	------	1655	10.9176
ν_{51}	ring (CC str.)	1571	1670	1621	1603	1544	2.159
ν_{52}	ring (CC str.)	1571	1670	1621	1603	1544	2.159
ν_{53}	ring (CC str.)	1411	1591	1505	1495	1433	0.486
ν_{54}	ring (CC str.)	1411	1591	1505	1495	1433	0.486
ν_{55}	ring (CC str.)	1286	1426	1317	1313	1352	24.240
ν_{56}	ring (CC str.)	1286	1426	1317	1313	1352	24.240
ν_{57}	δCH	1170	1189	1215	1214	1253	1.146
ν_{58}	δCH	1170	1189	1215	1214	1253	1.146
ν_{59}	δCH	1102	1142	1137	1140	1177	10.500
ν_{60}	δCH	1102	1142	1137	1140	1177	10.500
ν_{61}	δr ing (δCCC)	890	955	------	------	826	0.009
ν_{62}	δ ring (δCCC)	890	955	------	------	826	0.009
ν_{63}	δ ring (δCCC)	696	698	772	775	800	5.654
ν_{64}	δ ring (δCCC)	696	698	772	775	800	5.654
ν_{65}	δ ring (δCCC)	372	403	------	379	391	3.645
ν_{66}	δ ring (δCCC)	372	403	------	379	391	3.645
A_{2g}							
ν_{9}	CH str.	3030	3047	------	------	3030	0.000
ν_{10}	ring (CC str.)	1599	1698	------	------	1582	0.000
ν_{11}	δCH	1154	1168	------	------	1283	0.000
ν_{12}	δ ring (δCCC)	810	919	------	------	947	0.000
ν_{13}	δ ring (δCCC)	593	657	------	------	655	0.000
B_{2u}							
ν_{29}	CH str.	3031	3045	------	------	3050	0.000
ν_{30}	ring (CC str.)	1569	1780	1533	------	1525	0.000
ν_{31}	ring (CC str.)	1326	1402	------	------	1380	0.000
ν_{32}	δCH	109	1179	-----	-----	121	0.0

$<H_2C_2C_1$	119.5	120.1	120.5
$<H_1C_1C`_1$	118.1	118.6	118.5

Table (2): Vibrational frequencies for neutral Coronene molecule.

Symmetry & discription		Frequency cm^{-1}					intensity
		MINDO/3 scaled.	PM3	Exptl. [2, 3]	Calcd. [4, 6]	DFT (B3LYP/6-311G)	(DFT) km/mol
	In-plane						
A_{1g}							
ν_1	CH str.	3049	3062	------	------	3055	0.000
ν_2	ring (CC str.)	1710	1799	1719	------	1639	0.000
ν_3	ring (CC str.)	1390	1596	------	------	1384	0.000
ν_4	δCH	1210	1292	------	------	1262	0.000
ν_5	δ ring (δCCC)	1050	1123	------	------	1055	0.000
ν_6	δ ring (δCCC)	563	598	------	------	483	0.000
B_{1u}							
ν_{21}	CH str.	3043	3063	------	------	3034	0.000
ν_{22}	ring (CC str.)	1588	1741	1579	------	1584	0.000
ν_{23}	ring (CC str.)	1431	1515	------	------	1470	0.000
ν_{24}	δCH	1123	1265	------	------	1196	0.000
ν_{25}	δ ring (δCCC)	1092	1135	------	------	690	0.000
ν_{26}	δ ring (δCCC)	437	485	------	------	567	0.000
E_{1u}							
ν_{45}	CH str.	3047	3062	3051	------	3054	155.937
ν_{46}	CH str.	3047	3062	3051	------	3054	155.937
ν_{47}	CH str.	3030	3047	3044	------	3031	10.462
ν_{48}	CH str.	3030	3047	3044	------	3031	10.462

					--		00
ν_8	γCC	447	459	----- --	----- --	537	0.0 00
A_{2u}							
ν_{14}	γCH	820	889	----- --	----- --	895	197 .98 3
ν_{15}	γCC	545	558	----- --	----- --	572	41. 456
ν_{16}	γCC	129	123	----- --	----- --	129	7.2 57
B_{2g}							
ν_{27}	γCH	748	790	----- --	----- --	726	0.0 00
ν_{28}	γCC	142	139	----- --	----- --	232	0.0 00
E_{1g}							
ν_{35}	γCH	867	981	----- --	----- --	990	0.0 00
ν_{36}	γCH	867	981	----- --	----- --	990	0.0 00
ν_{37}	γCH	805	868	----- --	----- --	871	0.0 00
ν_{38}	γCH	805	868	----- --	----- --	871	0.0 00
ν_{39}	γCC	619	651	----- --	----- --	672	0.0 00
ν_{40}	γCC	619	651	----- --	----- --	672	0.0 00
ν_{41}	γCC	407	408	----- --	----- --	464	0.0 00
ν_{42}	γCC	407	408	----- --	----- --	464	0.0 00
ν_{43}	γCC	285	285	----- --	----- --	302	0.0 00
ν_{44}	γCC	285	285	----- --	----- --	302	0.0 00
E_{2u}							
ν_{91}	γCH	873	1001	----- --	----- --	100 4	0.0 00
ν_{92}	γCH	873	1001	----- --	----- --	100 4	0.0 00
ν_{93}	γCH	776	842	----- --	----- --	824	0.0 00
ν_{94}	γCH	776	842	----- --	----- --	824	0.0 00
ν_{95}	γCC	730	791	----- --	----- --	745	0.0 00
ν_{96}	γCC	730	791	----- --	----- --	745	0.0 00
ν_{97}	γCC	531	536	----- --	----- --	559	0.0 00
ν_{98}	γCC	531	536	----- --	----- --	559	0.0 00
ν_{99}	γCC	267	270	----- --	----- --	307	0.0 00
ν_{100}	γCC	267	270	----- --	----- --	307	0.0 00
ν_{101}	γCC	77	78	----- --	----- --	90	0.0 00
ν_{102}	γCC	77	78	----- --	----- --	90	0.0 00

		9		--	--	7	00
ν_{33}	δ ring (δCCC)	639	692	----- --	----- --	118 6	0.0 00
ν_{34}	δ ring (δCCC)	527	580	550	549	492	0.0 00
E_{2g}							
ν_{67}	CH str.	304 4	3063	----- --	----- --	305 2	0.0 00
ν_{68}	CH str.	304 4	3063	----- --	----- --	305 2	0.0 00
ν_{69}	CH str.	303 1	3046	----- --	----- --	303 3	0.0 00
ν_{70}	CH str.	303 1	3046	----- --	----- --	303 3	0.0 00
ν_{71}	ring (CC str.)	167 5	1821	169 6	----- --	165 6	0.0 00
ν_{72}	ring (CC str.)	167 5	1821	169 6	----- --	165 6	0.0 00
ν_{73}	ring (CC str.)	151 8	1653	153 0	----- --	149 4	0.0 00
ν_{74}	ring (CC str.)	151 8	1653	153 0	----- --	149 4	0.0 00
ν_{75}	ring (CC str.)	143 9	1582	149 8	----- --	147 0	0.0 00
ν_{76}	ring (CC str.)	143 9	1582	149 8	----- --	147 0	0.0 00
ν_{77}	ring (CC str.)	135 4	1489	----- --	----- --	143 5	0.0 00
ν_{78}	ring (CC str.)	135 4	1489	----- --	----- --	143 5	0.0 00
ν_{79}	δCH	122 5	1283	----- --	----- --	126 3	0.0 00
ν_{80}	δCH	122 5	1283	----- --	----- --	126 3	0.0 00
ν_{81}	δCH	112 1	1154	----- --	----- --	120 3	0.0 00
ν_{82}	δCH	112 1	1154	----- --	----- --	120 3	0.0 00
ν_{83}	δ ring (δCCC)	102 2	1085	----- --	----- --	101 7	0.0 00
ν_{84}	δ ring (δCCC)	102 2	1085	----- --	----- --	101 7	0.0 00
ν_{85}	δ ring (δCCC)	635. 6	693	----- --	----- --	702	0.0 00
ν_{86}	δ ring (δCCC)	635. 6	693	----- --	----- --	702	0.0 00
ν_{87}	δ ring (δCCC)	472	525	----- --	----- --	508	0.0 00
ν_{88}	δ ring (δCCC)	472	525	----- --	----- --	508	0.0 00
ν_{89}	δ ring (δCCC)	373	366	----- --	----- --	376	0.0 00
ν_{90}	δ ring (δCCC)	373	366	----- --	----- --	376	0.0 00
	Out of plane						
A_{1u}							
ν_7	γCH	863	967	846	-----	982	0.0

$C_1C`_1$	1.461	1.408
$C`_2C`_4$	1.465	1.435
$C`_5C`_7$	1.468	1.426
$C`_6C_5$	1.421	1.421
C_5C_6	1.400	1.374
$C_6C`_8$	1.421	1.440
$C`_7C`_8$	1.467	1.437
H_1C_1	1.108	1.084
H_2C_2	1.112	1.084
H_3C_3	1.112	1.084
H_4C_4	1.108	1.086
H_5C_5	1.109	1.086

Mindo/3 scaling factors: 0.876 (CH str.); 0.96 (ring (CC) str.); 1.06 (δCH); 1.08 (ring(δCCC); 1.11 (γCH); 1.11 (γCCC); 1.03 (γCC).
Special scaling factors were used for vibration modes with overlaps of different types of motion; 1.06 (ring (CCC) str. + δCH); 1.11 (γCCC + γCH) or (γCC + γCH); 1.03 (γCH + γCC).[7]
γ: out of plane bending vibration., δ: in- plane bending vibration.

Table (3): Calculated geometry for Coronene anion radical.

Bond length (Å) & Bond angles (deg.)	MINDO/3	DFT (B3LYP/6-311G)
C_1C_2	1.371	1.398
$C_2C_3`$	1.415	1.408
$C_3C_3`$	1.445	1.440
C_3C_4	1.371	1.374
$C_4C_6`$	1.461	1.421
$C_5`C_6`$	1.468	1.443
$C_4`C_5`$	1.465	1.426
$C_3`C_4`$	1.468	1.437

< $H_{32}C_{19}C_{14}$	118.0	------
< $H_{35}C_{23}C_{17}$	119.1	------
< $H_{36}C_{24}C_{20}$	119.1	------
Heat of formation (ΔH_f) 126.979 kcal/ mol		

Table (4): Vibrational frequencies and IR absorption intensities for Coronene radical anion.

Symmetry& Description		Frequency cm^{-1}		Intensity (DFT) (km/mole)
		MINDO/3 Scaled	DFT (B3LYP/6-311G)	
in-plane				
A_g				
ν_1	CH str.	3023	3027	0.00
ν_2	CH str.	3009	3019	0.00
ν_3	CH str.	2991	2995	0.00
ν_4	ring (CC str.)	1647	1651	0.00
ν_5	ring (CC str.)	1551	1615	0.00
ν_6	ring (CC str.)	1416	1490	0.00
ν_7	ring (CC str.)	1404	1473	0.00
ν_8	ring (CC str.)	1385	1433	0.00
ν_9	ring (CC str.)	1298	1394	0.00
ν_{10}	δCH	1207	1280	0.00
ν_{11}	δCH	1153	1259	0.00
ν_{12}	δCH	1107	1190	0.00
ν_{13}	δ ring (δCCC)	1047	1063	0.00
ν_{14}	δ ring (δCCC)	1015	1011	0.00
ν_{15}	δ ring (δCCC)	643	700	0.00
ν_{16}	δ ring (δCCC)	473	507	0.00
ν_{17}	δ ring (δCCC)	431	484	0.00

H_6C_6	1.109	1.084
< $C`_2C`_4C`_5$	119.9	------
< $C`_2C`_4C`_3$	120.0	------
< $C`_4C`_3C_3$	117.3	------
< $C`_3C_3C_4$	123.0	------
< $C`_4C`_5C`_6$	120.2	------
< $C`_4C`_3C_2$	117.3	------
< $C`_5C`_6C_5$	117.8	------
< $C`_7C`_8C_6$	117.8	------
< $H_{29}C_{15}C_{14}$	118.0	------
< $H_{30}C_{16}C_{15}$	119.6	------
< $H_{31}C_{18}C_9$	118.0	------

ν_{93}	δ ring (δCCC)	117	131	0.00
	Out of plane			
Au				
ν_{19}	γCH	861	1022	0.00
ν_{20}	γCH	825	999	0.00
ν_{21}	γCH	738	828	0.00
ν_{22}	γCC	688	713	0.00
ν_{23}	γCC	521	535	0.00
ν_{24}	γCC	499	506	0.00
ν_{25}	γCC	298	331	0.00
ν_{26}	γCC	70	87	0.00
B_{1g}				
ν_{27}	γCH	859	1014	0.00
ν_{28}	γCH	821	890	0.00
ν_{29}	γCH	707	806	0.00
ν_{30}	γCC	634	655	0.00
ν_{31}	γCC	423	448	0.00
ν_{32}	γCC	277	288	0.00
ν_{33}	γCC	162	201	0.00
B_{2g}				
ν_{51}	γCH	993	1031	0.00
ν_{52}	γCH	829	1006	0.00
ν_{53}	γCH	829	1006	0.00
ν_{54}	γCH	769	885	0.00
ν_{55}	γCC	678	692	0.00
ν_{56}	γCC	590	654	0.00
ν_{57}	γCC	450	584	0.00
ν_{58}	γCC	320	386	0.00
ν_{59}	γCC	268	301	0.00
ν_{60}	γCC	224	251	0.00
B_{3u}				
ν_{94}	γCH	867	1027	4.23
ν_{95}	γCH	823	914	192.80
ν_{96}	γCH	719	844	0.21
ν_{97}	γCC	698	703	1.28
ν_{98}	γCC	560	573	32.45
ν_{99}	γCC	505	549	9.39
ν_{100}	γCC	268	303	0.17
ν_{101}	γCC	128	130	3.94
ν_{102}	γCC	75	91	0.12

γ: out of plane bending vibration. , δ: in- plane bending vibration.

Scaling factors: 0.96 (CH str.) for all DFT (B3LYP/6-311G) frequencies, [8].

جدول (5): ابعاد وزوايا التآصر المحسوبة لجذرالكورونين الموجب.

Bond length (Å) & Bond angles (deg.)	MINDO/3	DFT (B3LYP/6-311G)

ν_{18}	δ ring (δCCC)	336	378	0.00
B_{1u}				
ν_{34}	CH str.	3015	3023	352.00
ν_{35}	CH str.	2994	2998	6.23
ν_{36}	CH str.	2990	2994	141.00
ν_{37}	ring (CC str.)	1616	1632	6.55
ν_{38}	ring (CC str.)	1548	1571	2.53
ν_{39}	ring (CC str.)	1494	1536	42.17
ν_{40}	ring (CC str.)	1433	1475	3.46
ν_{41}	ring (CC str.)	1360	1428	57.88
ν_{42}	ring (CC str.)	1269	1349	22.64
ν_{43}	δCH	1158	1264	28.61
ν_{44}	δCH	1125	1196	2.86
ν_{45}	δCH	1095	1185	35.69
ν_{46}	δ ring (δCCC)	766	809	31.45
ν_{47}	δ ring (δCCC)	736	790	11.37
ν_{48}	δ ring (δCCC)	636	687	2.54
ν_{49}	δ ring (δCCC)	533	561	1.23
ν_{50}	δ ring (δCCC)	371	391	6.66
B_{2u}				
ν_{78}	CH str.	2993	2997	0.00
ν_{79}	CH str.	2981	2990	0.00
ν_{80}	ring (CC str.)	1569	1582	0.00
ν_{81}	ring (CC str.)	1520	1548	0.00
ν_{82}	ring (CC str.)	1488	1505	0.00
ν_{83}	ring (CC str.)	1393	1450	0.00
ν_{84}	ring (CC str.)	1266	1355	0.00
ν_{85}	δCH	1245	1285	0.00
ν_{86}	δCH	1126	1223	0.00
ν_{87}	δCH	1032	1045	0.00
ν_{88}	δ ring (δCCC)	860	946	0.00
ν_{89}	δ ring (δCCC)	686	757	0.00
ν_{90}	δ ring (δCCC)	619	675	0.00
ν_{91}	δ ring (δCCC)	567	648	0.00
ν_{92}	δ ring (δCCC)	401	493	0.00

< C\`$_4$C\`$_5$C\`$_6$	< C\`$_4$C\`$_3$ C$_3$	< C\`$_2$C\`$_4$C\`$_3$	H$_6$C$_6$ < C\`$_2$C\`$_4$C\`$_5$	H$_5$C$_5$	H$_4$C$_4$	H$_3$C$_3$	H$_2$C$_2$	H$_1$C$_1$	C\`$_7$C\`$_8$	C$_6$C\`$_8$	C$_5$C$_6$
120.1	117.8	119.8	1.105 120.0	1.105	1.106	1.104	1.104	1.106	1.471	1.430	1.406
------	------	------	1.081 ------	1.081	1.081	1.081	1.081	1.081	1.425	1.437	1.371

C\`$_6$C$_5$	C\`$_5$C\`$_7$	C\`$_2$C\`$_4$	C$_1$C\`$_1$	C$_3$\`C$_4$\`	C$_4$\`C$_5$\`	C$_5$\`C$_6$\`	C$_4$C$_6$\`	C$_3$C$_4$	C$_3$C$_3$\`	C$_2$C$_3$´	C$_1$C$_2$
1.419	1.467	1.459	1.467	1.487	1.459	1.470	1.467	1.372	1.447	1.447	1.372
1.425	1.420	1.426	1.408	1.425	1.420	1.439	1.425	1.371	1.437	1.408	1.396

ν_{2}	CH str.	3062	3072	-----	0.00	-----
ν_{3}	CH str.	3056	3057	-----	0.00	-----
ν_{4}	ring (CC str.)	1584	1639	-----	0.00	-----
ν_{5}	ring (CC str.)	1547	1608	-----	0.00	-----
ν_{6}	ring (CC str.)	1442	1474	-----	0.00	-----
ν_{7}	ring (CC str.)	1410	1456	-----	0.00	-----
ν_{8}	ring (CC str.)	1368	1417	-----	0.00	-----
ν_{9}	ring (CC str.)	1326	1371	-----	0.00	-----
ν_{10}	δCH	1229	1262	-----	0.00	-----
ν_{11}	δCH	1201	1235	-----	0.00	-----
ν_{12}	δCH	1108	1170	-----	0.00	-----
ν_{13}	δ ring (δCCC)	1043	1044	-----	0.00	-----
ν_{14}	δ ring (δCCC)	1001	1008	-----	0.00	-----
ν_{15}	δ ring (δCCC)	632	701	-----	0.00	-----
ν_{16}	δ ring (δCCC)	553	504	-----	0.00	-----
ν_{17}	δ ring (δCCC)	473	480	-----	0.00	-----
ν_{18}	δ ring (δCCC)	343	374	-----	0.00	-----
B_{1u}						
ν_{34}	CH str.	3067	3075	-----	37.24	-----
ν_{35}	CH str.	3056	3057	-----	0.29	-----
ν_{36}	CH str.	3052	3055	-----	0.42	-----
ν_{37}	ring (CC str.)	1561	1611	-----	106.00	-----
ν_{38}	ring (CC str.)	1521	1552	-----	22.00	-----

< C`5C`6 C5	118.0	-------
< C`7C`8 C6	117.2	-------
< H29C15C14	118	-------
<H30C16C15	119.3	-------
<H31C18C9	117.6	-------
<H32C19C14	119.8	-------
<H35C23C17	119.0	-------
<H36C24C20	118.2	-------
Heat of formation	303.810 kcal/mol	

Table (6): Vibrational frequencies and IR absorption intensities for Coronene cation radical

Symmetry & description		Frequency cm^{-1}			Intensity(km/mol)	
		MINDO/3 Scaled	DFT (B3LYP/ 6-311G)	Exptl. [2, 3]	DFT (B3LYP/6-311G)	Exptl. [2, 3]
	in-plane					
A_g						
ν_{1}	CH str.	3069	3076	-----	0.00	-----

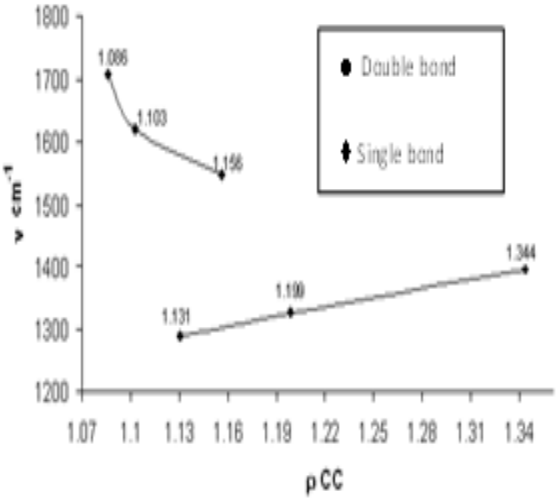
ν_{70}	δCH	1162	1226	-----	37.00	-----
ν_{71}	δCH	1103	1161	-----	1.61	-----
ν_{72}	δ ring (δCCC)	1084	1144	-----	89.00	-----
ν_{73}	δ ring (δCCC)	817	871	-----	10.70	-----
ν_{74}	δ ring (δCCC)	687	792	-----	4.86	-----
ν_{75} ν_{76}	δ ring (δCCC) δ ring (δCCC)	436 366	485 383	----- -----	5.17 35.90	----- -----
B_{3g}						
ν_{77}	CH str.	3067	3074	-----	0.00	-----
ν_{78}	CH str.	3056	3057	-----	0.00	-----
ν_{79}	CH str.	3052	3055	-----	0.00	-----
ν_{80}	ring (CC str.)	1582	1574	-----	0.00	-----
ν_{81}	ring (CC str.)	1524	1522	-----	0.00	-----
ν_{82}	ring (CC str.)	1481	1484	-----	0.00	-----
ν_{83}	ring (CC str.)	1392	1421	-----	0.00	-----
ν_{84}	ring (CC str.)	1284	1332	-----	0.00	-----
ν_{85}	δCH	1204	1272	-----	0.00	-----
ν_{86}	δCH	1144	1204	-----	0.00	-----
ν_{87}	δCH	1011	1105	-----	0.00	-----
ν_{88}	δ ring (δCCC)	938	1011	-----	0.00	-----
ν_{89}	δ ring (δCCC)	702	806	-----	0.00	-----
ν_{90}	δ ring (δCCC)	639	652	-----	0.00	-----
ν_{91}	δ ring (δCCC)	584	590	-----	0.00	-----

ν_{39}	ring (CC str.)	1474	1513	-----	130.00	-----
ν_{40}	ring (CC str.)	1367	1457	-----	5.90	-----
ν_{41}	ring (CC str.)	1310	1399	-----	128.00	-----
ν_{42}	ring (CC str.)	1284	1337	-----	36.00	-----
ν_{43}	δCH	1158	1248	-----	26.30	-----
ν_{44}	δCH	1091	1187	-----	4.87	-----
ν_{45}	δCH	1087	1158	-----	1.41	-----
ν_{46}	δ ring (δCCC)	803	859	-----	19.40	-----
ν_{47}	δ ring (δCCC)	699	782	-----	17.30	-----
ν_{48}	δ ring (δCCC)	638	686	-----	8.50	-----
ν_{49}	δ ring (δCCC)	517	556	-----	1.76	-----
ν_{50}	δ ring (δCCC)	355	390	-----	9.24	-----
B_{2u}						
ν_{60}	CH str.	3067	3074	-----	23.55	-----
ν_{61}	CH str.	3062	3072	-----	10.99	-----
ν_{62}	CH str.	3056	3056	-----	2.51	-----
ν_{63}	ring (CC str.)	1557	1604	1579	170.00	148.00
ν_{64}	ring (CC str.)	1512	1525	-----	12.40	-----
ν_{65}	ring (CC str.)	1449	1475	-----	27.30	-----
ν_{66}	ring (CC str.)	1373	1377	-----	0.09	-----
ν_{67}	ring (CC str.)	1299	1355	1377	43.30	31.10
ν_{68}	ring (CC str.)	1277	1328	-----	363.00	-----
ν_{69}	δCH	1260	1254	-----	80.70	-----

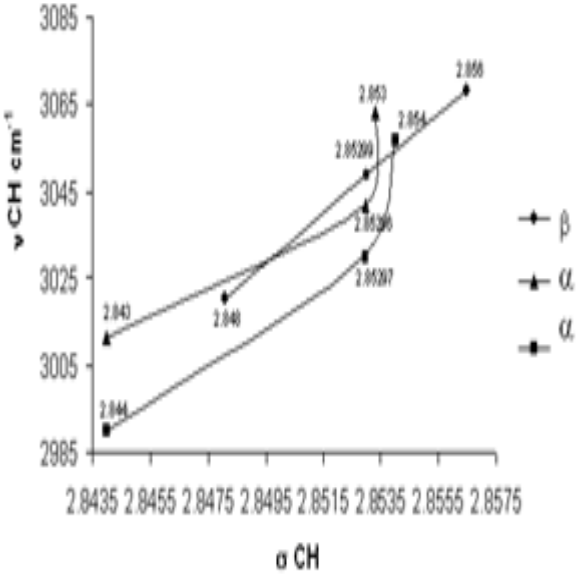
ν_{59}	γCC	193	232	-----	0.00	-----
B_{3u}						
ν_{94}	γCH	835	958	-----	0.61	-----
ν_{95}	γCH	791	837	875	204.60	179.00
ν_{96}	γCH	744	767	-----	1.59	-----
ν_{97}	γCC	717	741	-----	0.32	-----
ν_{98}	γCC	539	559	-----	34.33	-----
ν_{99}	γCC	505	543	-----	3.97	-----
ν_{100}	γCC	252	284	-----	0.21	-----
ν_{101}	γCC	125	135	-----	12.45	-----
ν_{102}	γCC	75	90	-----	0.047	-----

Mindo/3 scaling factors: 0.876 (CH str.); 0.96 (ring (CC) str.); 1.06 (δCH); 1.08 (ring (δCCC); 1.11 (γCH); 1.11 (γCCC); 1.03 (γCC).
Special scaling factors were used for vibration modes with overlaps of different types of motion; 1.06 (ring (CCC) str. + δCH); 1.11 (γCCC + γCH) or (γCC + γCH); 1.03 (γCH + γCC). [6]
Scaling factors: 0.96 (CH str.) for all DFT (B3LYP/6-311G) frequencies, [8].
γ: out of plane bending vibration., δ: in- plane bending vibration.

ν_{92}	δ ring (δCCC)	434	450	-----	0.00	-----
ν_{93}	δ ring (δCCC)	138	336	-----	0.00	-----
	Out of plane					
A_u						
ν_{19}	γCH	841	939	-----	0.00	-----
ν_{20}	γCH	826	892	-----	0.00	-----
ν_{21}	γCH	749	786	-----	0.00	-----
ν_{22}	γCC	710	753	-----	0.00	-----
ν_{23}	γCC	494	552	-----	0.00	-----
ν_{24}	γCC	412	508	-----	0.00	-----
ν_{25}	γCC	258	310	-----	0.00	-----
ν_{26}	γCC	72	86	-----	0.00	-----
B_{1g}						
ν_{27}	γCH	828	936	-----	0.00	-----
ν_{28}	γCH	777	823	-----	0.00	-----
ν_{29}	γCH	720	744	-----	0.00	-----
ν_{30}	γCC	607	669	-----	0.00	-----
ν_{31}	γCC	382	467	-----	0.00	-----
ν_{32}	γCC	262	302	-----	0.00	-----
ν_{33}	γCC	134	156	-----	0.00	-----
B_{2g}						
ν_{51}	γCH	843	961	-----	0.00	-----
ν_{52} ν_{53}	γCH γCH	832 779	895 806	----- -----	0.00 0.00	----- -----
ν_{54}	γCC	738	771	-----	0.00	-----
ν_{55}	γCC	604	643	-----	0.00	-----
ν_{56}	γCC	573	584	-----	0.00	-----
ν_{57}	γCC	380	433	-----	0.00	-----
ν_{58}	γCC	275	282	-----	0.00	-----



شكل (4) العلاقة بين ترددات الاهتزاز لاواصر CH والكثافة الالكترونية لذرات الكاربون العائدة لتلك الاواصر للاصناف الثلاثة (المتعادل والسالب والموجب) لجزيئة الكورونين.



شكل (5) العلاقة بين ترددات الاهتزاز لأواصر CC ورتبة التاصر لذرات الكاربون العائدة لتلك الأواصر للأصناف الثلاثة (المتعادل والسالب والموجب) لجزيئة الكورونين

COMPARISION STUDY OF VIBRATION FREQUENCIES WITH BOND ORDERS OF CH AND CC BONDS IN CORONENE AND IT'S POSITIVE AND NEGATIVE RADICAL IONS USING QUANTUM MECHANICAL CALCULATIONS

REHAB M. KUBBA, MANAL AL-DELEIMY AND MUTHANA SHANSHAL

ABSTRACT.:

Vibration frequencies, IR absorption intensities and normal coordinates of the Coronene radical cation and anion were calculated applying the semiemperical methods MINDO/3 and PM3, and quantum mechanical method (DFT (B3LYP/6-311G)). The results allowed proper assignments for the frequencies of the experimentally known, radical cation vibrations. They provided preestimation of the radical anion frequencies. Comparison is done for the frequencies of the ions with those of the neutral Coronene molecule. It was found that the C-H stretching frequencies are directly related to the carbon σ-electron densities of the relevant atoms. This is not true for the change in the CC stretching frequencies, which seem to be due to the change in symmetry from D6h for the neutral molecule to D2h for its positive and negative radical ions.