



## حسابات DFT لترددات اهتزاز و شدد امتصاص طيف الاشعة تحت الحمراء لجزيئة [6] سايكلاسين (Armchair)

رحاب ماجد كبة

جامعة بغداد - كلية العلوم

### الخلاصة:

تم حساب ترددات الاهتزاز و شدد امتصاص طيف الاشعة تحت الحمراء، لجميع الاحداثيات الداخلية لجزيئة [6] سايكلاسين نوع (Armchair) و بعدها (3N-6) و مناقشتها تماثليا و تأصريا وفق نظرية دوال الكثافة (DFT) وباسلوب (B3LYP) وعناصر قاعدة (6-311G). كانت قيم ترددات الاهتزاز المحسوبة قريبة من القيم التجريبية للعدد القليل جدا من قيم ترددات الاهتزاز المستخرجة لانايبب المبنية من هذا النوع من الجزيئات. و عند مقارنة نتائج الحسابات، وجد بأن ترددات الاهتزاز للانماط المتماثلة لحركات المط التأصيرية أعلى من تلك غير المتماثلة لاواصر (C-H) والعكس لاواصر (C-C)، و تكون ترددات الاهتزاز غير المتماثلة للحركات الانثنائية ( $\delta CH$ ) و ( $\delta CC$ ) أعلى من نظائرها المتماثلة. ويمكن

### معلومات البحث:

تاريخ التسليم: 2010/10/7  
تاريخ القبول: 2011/2/14  
تاريخ النشر: 2012 /6 /14  
DOI:10.37652/juaps.2011.15475

### الكلمات المفتاحية:

DFT ،  
ترددات اهتزاز ،  
شدد امتصاص ،  
الاشعة تحت الحمراء ،  
[6] سايكلاسين (Armchair).

### المقدمة

تمت أيضا دراسة علاقة القوة المثالية لأنايبب النانوكاربون بأطوال أواصر (C-C) المتجهة على طول المحور السيني (C-Caxial) في أنايبب النانوكاربون أحادية الطبقة، وبأطوال أواصر (C-C) المتجهة على طول محيط انبوب النانوكاربون (C-Circumference)، (شكل 1- [10-11]).

وتتكون أنايبب النانوكاربون أحادية الطبقة (SWCNT) المفردة (Single Wall Carbon Nanotube) من حلقات البنزين السداسية متصلة مع بعضها البعض بشكل طوق. و تمتلك ذرات الكربون فيها تهجين من نوع ps2 مشابه لما موجود في صفيحة الكرافيت ذات الحلقات الكربونية السداسية [12].

أما في ما يتعلق بحسابات ودراسة ترددات الاهتزاز في أنايبب النانوكاربون، وجد أن التشوهات الحاصلة في شكل أنايبب النانو تحصل نتيجة للحركات الاهتزازية على طول المحور السيني لأنبوب النانوكاربون والتي تؤدي الى التغير في الخاصية الالكترونية والميكانيكية لأنبوب النانوكاربون. وقد وجد تجريبياً أن هناك ثلاثة أنماط أساسية من ترددات الاهتزاز لأننايبب النانوكاربون أحادية الطبقة التي لها التأثير المباشر في خواصها التوصيلية، هي: أنماط الاهتزاز التنفسية (breathing modes)، وأنماط الانبعاج (modes puckering)، وأنماط انحناء الجزيئة مع عكس عقرب الساعة

يتعامل علم تقنية النانوتكنولوجي مع الأنظمة والتراكيب التي يقع قطرها في حدود (1-100nm) التي ويسبب قطرها الصغير (اصغر 10000 مرة من قطر الشعرة في جسم الانسان)، تظهر اختلافاً واضحاً عن الانظمة الاخرى في الخواص الكيميائية والفيزيائية والبايولوجية [1].

وقد تمت معرفة تراكيب النانوكاربون متعددة الطبقات (MWCNTs) لأول مرة من قبل العالم (Iijima) عام 1991 [2]، الذي بين ان صفيحة الكربون يمكن ان تتحني لتكوين أنايبب نانوكاربون متعددة الطبقات (MWCNT) بأشكال مختلفة. وقد تمت دراسة الخواص الالكترونية لهذه الأنايبب نظريا بطرائق تتعلق بميكانيك الكم وعلى وفق فيزياء المادة، والميكانيك الستاتيكي [3-8].

وكذلك درس العالم (Hamada) ومجموعته الخواص الالكترونية لأننايبب النانوكاربون نظريا وبين اعتماد صفاتها بصورة رئيسة على الأقطار والكيرالية (Chirality) والى مجموعة النقطة [9].

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

$$9A1+ 9A2+ 9B1+ 9B2+ 18E1+ 18E2+ 18E3+ 18E4 +18E5$$

هناك ثلاث من هذه الدرجات دورانية [Γrotation (zR)]

Γtranslation. [E5 (Ry, xR) , A2

[(E1 (yT,xT) , B2 (zT)] يصبح عدد درجات الحرية الاهتزازية

Γvib مساوياً الى:

$$\Gamma_{vib} = \Gamma_{tot} - (\Gamma_{rot} + \Gamma_{tran}) = 3N - 6$$

$$\Gamma_{vib} = 216 - 6 = 210$$

$$9A1+ 8A2+ 9B1+ 8B2+ 17E1+ 18E2+ 18E3 + 18E4+ 17E5$$

وتتضمن ترددات الاهتزاز 79 نمطاً فعالاً في طيف رامان

[18E2 و 17E5 و 9A1], و 43 نمطاً فعالاً في طيف الاشعة تحت

الحمراء [(Tx, Ty, Tz), 18E1, 7B2] تم تصنيفها على النحو الاتي:

#### ترددات مط الاصرة CH

وعدها 24 نمطاً اهتزازياً بقدر عدد اواصر (C-H)، وتتراوح

القيم العددية المحسوبة لتردداتها بين (3083-3046) سم-

1، وبالتدقيق في (جدول-2) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة للانماط

الفعالة في طيف الاشعة تحت الحمراء هي 93.009 كم/مول وتعود

للنمط 61(B2)ν عند التردد 3082 سم-1. كما ويمكن ملاحظة

العلاقة الاتية:

$$v_{sym} (CH \text{ str.}) (3083 \text{ cm}^{-1}) >$$

$$v_1 (A_1)$$

$$v_{asym} (CH \text{ str.}) (3046 \text{ cm}^{-1})$$

$$v_{10} (B_1)$$

#### ترددات مط اواصر (C-C) الحلقية

و تتراوح القيم العددية المحسوبة لتردداتها بين (1315-

1635) سم-1، وبالتدقيق في (جدول-2) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة

للانماط الفعالة في طيف الاشعة تحت الحمراء هي 21.624 كم/

مول وتعود للنمط 23(E1)ν عند التردد 1635 سم-1 كما و يمكن

ملاحظة العلاقات الاتية:

$$v_{sym} (C=C \text{ str.}) (1634 \text{ cm}^{-1}) < v_2 (A_1)$$

$$v_{asym} C=C \text{ str.}) (1635 \text{ cm}^{-1})$$

$$v_{23} (E_1) \text{ circum. } v_{sym} (C--C \text{ str.}) (1406 \text{ cm}^{-1}) <$$

$$v_3 (A_1)$$

$$v_{asym} (C--C \text{ str.}) (1596 \text{ cm}^{-1})$$

$$v_{11} (B_1)_{axial}$$

(clock & anticlock wise) [13]. وأثبتت الدراسات أن قيم

ترددات الأنماط الاهتزازية الفعالة في طيف الأشعة تحت الحمراء تعتمد

على الأقطار، والكيرالية، ونوع الأنبوب، وطول الأنبوب، مع الأخذ بعين

الاعتبار التماثل لأنابيب النانوكاربون [14]. وتعد هذه الدراسات

بصمات اصعب لطيف امتصاص الأشعة تحت الحمراء، والهدف منها

تفسير وفهم الصفات المميزة لأنابيب النانو كربون ومنها استقرارها، و

توصيلها الكهربائي العالي [15-17].

كما تمت دراسة تأثير التشوهات والعيوب الناتجة من الحركة

الاهتزازية في الخواص الالكترونية لأنابيب النانوكاربون (CNTs) في

معهد بحوث ماكس بلانك للحالة الصلبة، وذلك باستخدام تقنية المسح

الميكروسكوبي الأنبوبي. وبينت الدراسات أيضاً أن التشوهات الحاصلة

من جراء الاهتزاز عند بعض أنماط الحركة الاهتزازية قد تقلل بدورها

من قابلية التوصيل الحراري والالكتروني للأنبوب [18]. تتكون جزيئة

[6] سايكلسين نوع Armchair من اثنا عشر حلقة سداسية، تم

حساب الشكل الهندسي التوازني لها وفق طريقة الحساب التامة لنظرية

دوال الكثافة (DFT) وباسلوب (D3LYP/6-311G), وجد امتلاكها

للتماثل (D6d) [19] وفق الشكل الهندسي التوازني لها (شكل-3). و

تبعاً لهذا التماثل، تم حساب حرارة التكوين والاحداثيات الهندسية

الداخلية (اطوال و زوايا التاصر) وبعض الخواص الفيزيائية عند الشكل

الهندسي المتوازن (شكل 4)، (جدول -1).

ويلاحظ في (جدول-1) أن أقصر الاواصر تعود الى

الواصر المحيطة كالاصرة (C1-C2) الثنائية وبالتالي فانها أقوى

الواصر وثابت القوى لتردداتها هي الاكبر، تليها أطوال الأواصر

المحورية كالاصرة (C1-C6) المقترنة، ثم الاواصر المحيطة الداخلية

كالاصرة (C7-C8) المنفردة والتي هي أطول الأواصر وأضعفها

وثابت القوى لتردداتها هي الاقل وينسجم هذا مع قيم ترددات اهتزاز

المط لهذه الاواصر جدول (2).

#### تصنيف ترددات الاهتزاز

تمتلك جزيئة [6] سايكلسين نوع Armchair 210

نمطاً اهتزازياً من الترددات الاساسية ( Fundamental vibrations

) وبعده (3N-6). تم استخراج العدد الكلي للاصناف

التماتلية Γtot. مع استخراج الاصناف التماثلية غير القابلة للاختزال

وتساوي 216 نمطاً اهتزازياً. Γtot = 3N = 3 × 72 = 216

ولا يوجد في الأدبيات ما يشير إلى التصنيف التماثلي والتكافؤي التام لترددات الاهتزاز و بعدد 3N-6 سواء للجزيئات المنفردة المحسوبة لأمثال هذه الجزيئة أو للأنابيب التي وحدة بنائها هذه الجزيئة وفق طريقة (DFT) [20] ، رغم كل ما ورد عن أهمية دراسة الحركات الاهتزازية وتصنيفها وطبيعتها في هذه الأنابيب، لذا قمنا بهذه الدراسة و تعد حساباتنا تنبؤية تامة.

ويوضح جدول (2) ترددات وشدت امتصاص الأشعة تحت الحمراء بعدد 3N-6 (متضمنة الاصناف الفعالة في طيف الأشعة تحت الحمراء (شدة الامتصاص لها  $\neq 0.0$ ))، والاصناف غير الفعالة في طيف الأشعة تحت الحمراء (شدة الامتصاص لها  $= 0.0$ )، مع التصنيف التكافؤي و التماثلي لها وبدقة وفق نظرية المجموعة، مع تعيين جميع أنماط الاهتزازية العائدة للحركات الانبعاجية و التنفسية والانحنائية باتجاه وعكس اتجاه عقرب الساعة، و التي تعود اليها التشوهات الحاصلة في أنابيب النانوكاربون من جراء الاهتزاز، و وفق هيرزبرك لتسلسل الانماط التماثلية [21].

ويبين (شكل 4-) الاشكال البيانية الواصفة لبعض أنماط الحركة الاهتزازية لجزيئة [6] سايكلاسين (Armchair)، كما تم حسابها وفق طريقة الحساب DFT ، وتصنيفها اعتمادا على الحركات الواصفة لها باستخدام برنامج Gaussian 03.

وعند مقارنة ترددات الاهتزاز لهذه الجزيئة مع الترددات المناظرة لها في جزيئة الفينانثرين الاروماتية المسطحة Planar والتي تم حسابها بنفس طريقة واسلوب وعناصر قاعدة الحساب (DFT (B3LYP/6-311G))، (جدول-3)، يلاحظ أن قيم ترددات الاهتزاز لجزيئة السايكلاسين أوطأ مما هي في جزيئة الفينانثرين، يشير هذا الى أن ثوابت القوى لترددات هذه الجزيئة أقل والى أن الاواصر العائدة لها اضعف مما هي عليه في جزيئة الفينانثرين والى كون جزيئة السايكلاسين اقل استقرارا يؤكد حرارة التكوين المحسوبة لها ( $\Delta H_f = 297.977$ ) kcal/mol التي هي أكبر بكثير من حرارة التكوين المحسوبة لجزيئة الفينانثرين ( $\Delta H_f = 54.864$  kcal/mol)، وفق نفس طريقة الحساب، و يعزى ذلك الى الشد الحلقي لمتسبب عند لف الحلقات الاروماتية بغرض تكوين الطوق الحلقي لجزيئة السايكلاسين. وأخيرا تمت دراسة توزيع الشحنة الالكترونية على ذرات هذه الجزيئة حيث وجد تمركزها بصورة رئيسة عند ذرات الكاربون المحيطة C-Cc (ذات الشحنات السالبة) و عند ذرات الهيدروجين (ذات الشحنات الموجبة)،

$\nu_{\text{sym}} (\text{C-C str.}) (1334 \text{ cm}^{-1}) <$   
 $\nu_4 (A_1)$   
 $\nu_{\text{asym}} (\text{C-C str.}) (1379 \text{ cm}^{-1}) \quad \nu_{79} (E_2)$   
circum.

#### ترددات مط اواصر الحلقية (CCC) str.

لاتتمركز متجهات ازاحات المط فيها عند ذرات كاربون اواصر محددة، وتتراوح قيم تردداتها للانماط الفعالة في طيف الأشعة تحت الحمراء بين (1406-1302) سم-1، وبالتدقيق في (جدول-2) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة 66.010 كم/مول وتعود للنمط  $\nu_{63} (E_1)$  عند التردد 1302 سم-1 .

#### ترددات انحناء الاصرة CH ( $\delta\text{CH}$ )

وتتراوح قيم تردداتها المحسوبة بين (1474-1180) سم-1، وبالتدقيق في (جدول-2) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة للانماط الفعالة في طيف الأشعة تحت الحمراء هي 26.290 كم/مول وتعود للنمط  $\nu_{33}(E_1)$  عند التردد 1214 سم-1 .

#### - ترددات الانحناء الحلقية ( $\delta\text{CCC}$ )

وتتراوح القيم العددية لتردداتها المحسوبة بين (1155-448) سم-1، وبالتدقيق في (جدول-2) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة للانماط الفعالة في طيف الأشعة تحت الحمراء 36.256 كم/مول وتعود للنمط  $\nu_{45} (E_1)$  عند التردد 543 سم-1.

#### ترددات انحناء الاصرة $\nu\text{CH}$

وتتراوح القيم العددية لتردداتها المحسوبة بين (993-706) سم-1، وبالتدقيق في (جدول-2) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة للانماط الفعالة في طيف الأشعة تحت الحمراء 144.421 كم/مول، وتعود للنمط  $\nu_{39} (E_1)$  عند التردد 822 سم-1 .

#### ترددات الانحناء الحلقية ( $\gamma\text{CCC}$ )

وتتراوح الترددات الاهتزازية المحسوبة بين (865-187) سم-1، وبالتدقيق في (جدول-2) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة للانماط الفعالة في طيف الأشعة تحت الحمراء 74.202 كم/مول ، وتعود للنمط  $\nu_{37} (E_1)$  عند التردد 865 سم-1 .

- 8- Iijima S, Brabec C, Maiti A, and Bernholc J. (1996). Structural flexibility of carbon nanotubes. *Journal of Chemical Physics*; 104(5): 2089–92.
- 9- Hamada, N., Sawada, S. & Oshiyama, (1992). A New one-dimensional conductors: graphitic microtubules. *Phys. Rev. Lett.*; 68: 1579–1581.
- 10- Budyka M.F., Zyubina T.S., Ryabenko A.G., Lin S. H. And Mebel A.H. (2005). Bond Lengths and diameters of armchair single wall carbon nanotubes. *Chem. Phys. Lett.* :407: 266-271.
- 11- Imtani A.N. and Jinal V.K. (2006). Bond Lengths of Single-Walled Carbon Nanotubes. Dept. of Phys., Panjab University, Chandigarh-160014, India;1-11.
- 12-a- Brown T.L.L., Bursten B.E., Lemay H.E., (1999). *Chemistry: The Central Science*, 8th edition, Prentice-Hall. :b- Carroll, D. L. et al. (1997). Electronic structure and localized states at carbon nanotube tips. *Phys. Rev. Lett.*; 78: 2811–2814.
- 13- Saito, R., Fujita, M., Dresselhaus, G. and Dresselhaus, M. S. (1992). Electronic structure of graphene tubules based on C60. *Phys. Rev. B* 46, 1804–1811.
- 14- Collins PG, Avouris P. (2000). Nanotubes for electronics. *Scientific American*; 283(6): 62–9.
- 15- Ramani K.A. and Chadl H. (2006). Infrared spectroscopy of SWCNTs. *J. phys.chem. ;B*. 110 (25): 12388-12393.
- 16- U. Kuhlman, H. Jantoljak, N. Pfander, P. Bernier, C. Journet and C. Thomsen, *Chem. Phys. Lett.* 294, 237-240, (1998).
- 17- Science direct-surface science Reports; (2005). Electronic and vibrational properties of chemically modified (SWCNTs), Article Tool book, Max-plank-Institut fuer, Germany, vol. 58, Issues 4, p. 1-5, August.
- 18- Vitali L., Bughard M., Schneider M.A., LeiLiu Y.Wu., Jayanthi C. and Kem K. (2004). Photon Spectromicroscopy of Carbon Nanostructures with Atomic Resolution. *Phys. Rev. Lett.*; 93:136103.
- 19- Davidson G. (1990). Introduction to group theory for Chemists. Applied Science Publishers Ltd. London, Elsevier Publishing Comp. Ltd.
- 20- Andzelm J.W. Labanowski and J.K. (1991). Density Functional Methods in Chemistry, Springer-Verlag, NewYork.
- 21- Herzberg G. (1971). Molecular Spectra and Molecular Structure, Infrared and Raman spectra of

في حين تتضائل عند ذرات الكربون البعيدة عن الحواف الخارجية للجزيئة.

ويتضح هذا في الشكل (5) حيث يلاحظ ان الشحنة الالكترونية على ذرات الكربون عند حافة الطوق النانوكاربوني اكبر (-0.132) للجزيئة وهذه اكبر سالبيه من الشحنات على ذرات الكربون الداخلية المساوية الى (-0.027).

وتتوافق هذه النتائج مع أطوال الاواصر (جدول-1) فالاقصر هي التي تتمركز عندها الشحنة الالكترونية بدرجة أكبر وهي التي ترددات الاهتزاز لها أكبر (جدول-2).

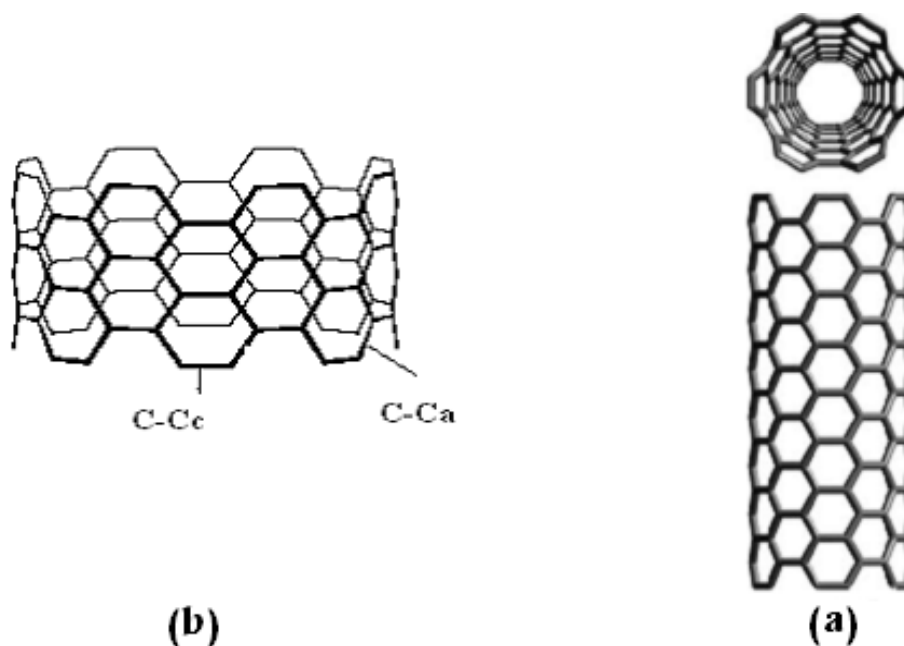
وتتوافق هذه النتائج أيضا مع ماشير اليه في الادبيات حول طبيعة توزيع الشحنة الالكترونية في أنابيب النانوكاربون المتشاكله من امثال هذه الجزيئات، ومن أن الشحنات الالكترونية تنتقل ميكانيكياً في انابيب النانوكاربون بين الاغلفة الخارجية من انبوب الى اخر [5,23-24]، و مع النتائج التي تم الحصول عليها عند حساب توزيع الشحنة الالكترونية لجزيئات سايكلاسين (Mono rings) بأنواع اخرى Zig (Chiral وzag) باستخدام حسابات ميكانيك الكم شبه التجريبية (MINDO/3) و (PM3) [25].

#### المصادر

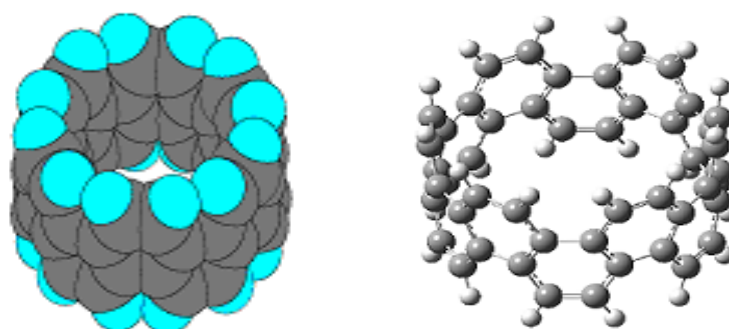
- 1-Meyyappan M. and Srivastava D. (2000). Carbon nanotube, Nasa Ames, Research center, Article. :16-18.
- 2- Iijima S. (1991). Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*; 354: 56–58.
- 3- Zettl A. and Cummings J. (2003). Electro mechanical properties of MWCNT. Department of phys.Univ. California, Ca.; 94: 720, U.S.A.
- 4- Xie S, Li W, Pan Z, Chang B, Sun L. (2000). Mechanical and physical properties on carbon nanotube. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*; 61(7): 1153–1158.
- 5- Krcmar M., Saslow W.M. and Zangwill A. (2003). Electrostatic of Conducting Nanocylinder. *J. Appl. phys.*; 93: 3495-3500.
- 6- Ruoff RS, Lorents DC. (1995). Mechanical and thermal-properties of carbon nanotubes. *Carbon*; 33(7): 925–30.
- 7- Gulseren O., Yildirim T. and Ciraci S. (2002). Systematic ab initio study of curvature effects in carbon nanotubes. *J. Phys. Rev.*; B 65: 153405.

- 24- Zhang, Z. & Lieber, C. M. (1993). Nanotube structure and electronic properties probed by STM. Appl. Phys.Lett. ;62 :2972–2974.
- 25- Al-Ani H. N. (2009). Theoretical study of vibration modes for Cyclacene and Collarene molecules. M.Sc. Thesis, College of Science, University of Baghdad.

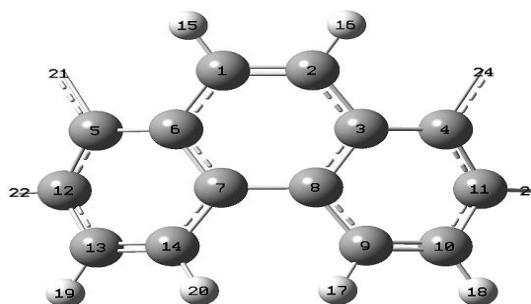
- Polyatomic Molecules, Van Nostrand Co, New York.
- 22- Lewars E. (2003) COMPUTATIONAL CHEMISTRY "Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics".,Chemistry Department, Trent University, Peterborough, Ontario, Canada.
- 23- Odom T.W., Huang J., Kim P. and Lieber C.M. (2000). Structure and electronic properties of CNT. J. Phy. Chem.;104: 2794-2809,



(شكل 1-): (a) انبوب نانوكاربون احادي الطبقة نوع Armchair، الشكل الهندسي الفراغي لجزيئة [6]سايكلاسين نوع Armchair، تتوضح فيه اواصر (C-Ca) المتجهه باتجاه المحور العمودي للجزيئة و اواصر (C-Cc) المتجهه على طول محيط الجزيئة.



(شكل-2): جزيئة [6] سايكلاسين نوع (Armchair) كما تم حسابها وفق طريقة الحساب DFT.



(شكل-3): مقطع الاواصر والزوايا المتكرر وفق تماثل الشكل الهندسي الفراغي التوازني (D6d) لجزيئة [6]سايكلاسين نوع (Armchair).

(جدول-1): اطوال وزوايا التآصر لجزيئة [6] سايكلاسين نوع (Armchair) وفق تماثل الشكل الهندسي الفراغي التوازني (D6d)، مع بعض الصفات الفيزيائية.

Bond length (Å) and Bond angles (deg.)	(DFT) B3LYP/ 6-311G
C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> **	1.366
C <sub>1</sub> C <sub>6</sub> *	1.435
C <sub>7</sub> C <sub>8</sub> **	1.452
C <sub>6</sub> C <sub>7</sub> *	1.417
C <sub>1</sub> H <sub>15</sub>	1.080
C <sub>2</sub> H <sub>16</sub>	1.080
< C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	120.651
< C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> H <sub>15</sub>	119.119
< C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	121.630
< C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>8</sub>	119.062
< C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	117.399
< C <sub>3</sub> C <sub>8</sub> C <sub>7</sub>	119.075
< C <sub>3</sub> C <sub>8</sub> C <sub>9</sub>	117.399
< C <sub>8</sub> C <sub>9</sub> C <sub>10</sub>	120.651
< C <sub>8</sub> C <sub>9</sub> H <sub>17</sub>	119.866
Molecular formula	C <sub>48</sub> H <sub>24</sub>
Point group	D <sub>6d</sub>
m.wt. (gm/mol)	600.718
ΔH <sub>f</sub> (kcal/mol)	297.977
Length (Å)	5.545
Diameter (Å)	8.383
HOMO (eV)	- 8.066
LUMO (eV)	- 1.257

\*: axial bond., \*\*: Circumference bond.

(جدول-2): ترددات الاهتزاز وشدة امتصاص الاشعة تحت الحمراء كما تم حسابها عند الشكل الهندسي التوازني لجزيئة [6]

سايكلاسين (Armchair).

Symmetry & description		DFT B3LYP/ 6-311G Freq. cm <sup>-1</sup>	Intensity km/mol
<b>A<sub>1</sub></b>			
v <sub>1</sub>	CH str.	3083	0.000
v <sub>2</sub>	ring (C=C str.)	1634	0.000
v <sub>3</sub>	ring (C--C--C str.)	1406	0.000
v <sub>4</sub>	ring (C-C str.) + δCH	1334	0.000
v <sub>5</sub>	δCH (sciss.)	1222	0.000
v <sub>6</sub>	γCH (wag.)	810	0.000
v <sub>7</sub>	δring (δCCC) (elongation)	662	0.000
v <sub>8</sub>	γring (γCCC) (breath.) + γCH (wag.)	346	0.000
v <sub>9</sub>	γring (γCCC) (breath.)	226	0.000
<b>B<sub>1</sub></b>			
v <sub>10</sub>	CH str.	3046	0.000
v <sub>11</sub>	ring (C--C str.)	1596	0.000
v <sub>12</sub>	δCH (rock.)	1474	0.000
v <sub>13</sub>	δCH (rock.) + δring (δCCC)(clock & anti clockwise)	1154	0.000
v <sub>14</sub>	γCH (twist.)	963	0.000
v <sub>15</sub>	δring (δCCC)	884	0.000
v <sub>16</sub>	γring (γCCC) (puckering)	635	0.000
v <sub>17</sub>	δring (δCCC) (clock & anticlockwise)	448	0.000
v <sub>18</sub>	γring (γCCC) (puckering)	398	0.000
<b>E<sub>1</sub></b>			
v <sub>19</sub>	CH str.	3080	42.581
v <sub>20</sub>	CH str.	3080	42.581
v <sub>21</sub>	CH str.	3048	9.982
v <sub>22</sub>	CH str.	3048	9.982
v <sub>23</sub>	ring (C=C str.)	1635	21.624
v <sub>24</sub>	ring (C=C str.)	1635	21.624
v <sub>25</sub>	δCH (rock.)	1495	13.437
v <sub>26</sub>	δCH (rock.)	1495	13.437
v <sub>27</sub>	ring (CCC str.)	1396	5.348
v <sub>28</sub>	ring (CCC str.)	1396	5.348
v <sub>29</sub>	ring (CCC str.) + δCH (sciss.)	1359	7.345
v <sub>30</sub>	ring (CCC str.) + δCH (sciss.)	1359	7.345
v <sub>31</sub>	δCH (rock.) + δring (δCCC)	1266	4.175
v <sub>32</sub>	δCH (rock.) + δring (δCCC)	1266	4.175
v <sub>33</sub>	δCH (sciss.)	1214	26.290
v <sub>34</sub>	δCH (sciss.)	1214	26.290
v <sub>35</sub>	γ(CH) (twist.)	976	20.347
v <sub>36</sub>	γ(CH) (twist.)	976	20.347
v <sub>37</sub>	γring (CCC) + γCH (wag.)	865	74.202
v <sub>38</sub>	γring (CCC) + γCH (wag.)	865	74.202

v <sub>39</sub>	$\gamma$ CH (wag.) + $\gamma$ ring (CCC)	822	144.421
v <sub>40</sub>	$\gamma$ CH (wag.) + $\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	822	144.421
v <sub>41</sub>	$\gamma$ CH (wag.) + $\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	763	16.591
v <sub>42</sub>	$\gamma$ CH (wag.) + $\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	763	16.591
v <sub>43</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) (elongation)	635	2.142
v <sub>44</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) (elongation)	635	2.142
v <sub>45</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) + $\delta$ CH (rock.)	543	36.256
v <sub>46</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) + $\delta$ CH (rock.)	543	36.256
v <sub>47</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) + $\gamma$ (CH) (twist.)	425	20.585
v <sub>48</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) + $\gamma$ (CH) (twist.)	425	20.585
v <sub>49</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	347	22.994
v <sub>50</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	347	22.994
v <sub>51</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	250	10.749
v <sub>52</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	250	10.749
<b>A<sub>2</sub></b>			
v <sub>53</sub>	CH str.	3046	0.000
v <sub>54</sub>	$\delta$ CH (rock.) + $\delta$ ring ( $\delta$ CCC)	1487	0.000
v <sub>55</sub>	$\delta$ CH (rock.)	1275	0.000
v <sub>56</sub>	$\gamma$ CH (twist.)	968	0.000
v <sub>57</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) (clock & anti clock wise)	850	0.000
v <sub>58</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	792	0.000
v <sub>59</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC)	552	0.000
v <sub>60</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	372	0.000
<b>B<sub>2</sub></b>			
v <sub>61</sub>	CH str.	3082	193.009
v <sub>62</sub>	ring (C=C str.)	1530	10.436
v <sub>63</sub>	ring (CCC str.) + $\delta$ CH (sciss.)	1302	66.010
v <sub>64</sub>	ring (CCC str.) + $\delta$ CH (sciss.)	1195	0.528
v <sub>65</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) + $\delta$ CH (sciss.)	1009	0.078
v <sub>66</sub>	$\gamma$ CH (wag.)	803	0.018
v <sub>67</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (breath.) + $\gamma$ CH (wag.)	530	2.968
v <sub>68</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (breath.)	184	0.027
<b>E<sub>2</sub></b>			
v <sub>69</sub>	CH str.	3074	0.000
v <sub>70</sub>	CH str.	3074	0.000
v <sub>71</sub>	CH str.	3055	0.000
v <sub>72</sub>	CH str.	3055	0.000
v <sub>73</sub>	ring (C=C str.)	1639	0.000
v <sub>74</sub>	ring (C=C str.)	1639	0.000
v <sub>75</sub>	ring (C--C str.) + $\delta$ CH	1515	0.000
v <sub>76</sub>	ring (C--C str.) + $\delta$ CH	1515	0.000
v <sub>77</sub>	ring (C--C str.) + $\delta$ CH	1397	0.000
v <sub>78</sub>	ring (C--C str.) + $\delta$ CH	1397	0.000
v <sub>79</sub>	ring (C-C str.)	1379	0.000
v <sub>80</sub>	ring (C-C str.)	1379	0.000
v <sub>81</sub>	ring (C-C str.)	1353	0.000
v <sub>82</sub>	ring (C-C str.)	1353	0.000



V83	$\delta$ CH (sciss.)	1199	0.000
V84	$\delta$ CH (sciss.)	1199	0.000
V85	$\gamma$ CH (twist.)	991	0.000
V86	$\gamma$ CH (twist.)	991	0.000
V87	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC)	885	0.000
V88	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC)	885	0.000
V89	$\gamma$ CH (wag.) + $\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	828	0.000
V90	$\gamma$ CH (wag.) + $\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	828	0.000
V91	$\gamma$ CH (twist.) + $\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	731	0.000
V92	$\gamma$ CH (twist.) + $\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	731	0.000
V93	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	595	0.000
V94	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	595	0.000
V95	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	560	0.000
V96	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	560	0.000
V97	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	460	0.000
V98	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	460	0.000
V99	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	439	0.000
V100	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	439	0.000
V101	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	194	0.000
V102	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	194	0.000
V103	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (breathing)	43	0.000
V104	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (breathing)	43	0.000
<b>E<sub>3</sub></b>			
V105	CH str.	3067	0.000
V106	CH str.	3067	0.000
V107	CH str.	3061	0.000
V108	CH str.	3061	0.000
V109	ring (C=C str.)	1630	0.000
V110	ring (C=C str.)	1630	0.000
V111	ring (C--C-C str.) + $\delta$ CH (rock.)	1541	0.000
V112	ring (C--C-C str.) + $\delta$ CH (rock.)	1541	0.000
V113	ring (C--C str.) + $\delta$ CH (rock.)	1416	0.000
V114	ring (C--C str.) + $\delta$ CH (rock.)	1416	0.000
V115	$\delta$ CH (rock.) + ring (C--C str.)	1259	0.000
V116	$\delta$ CH (rock.) + ring (C--C str.)	1259	0.000
V117	$\delta$ CH (sciss.) + ring (C--C str.)	1258	0.000
V118	$\delta$ CH (sciss.) + ring (C--C str.)	1258	0.000
V119	$\delta$ CH (sciss.)	1180	0.000
V120	$\delta$ CH (sciss.)	1180	0.000
V121	$\gamma$ CH (twist.)	999	0.000
V122	$\gamma$ CH (twist.)	999	0.000
V123	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC)	909	0.000
V124	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC)	909	0.000
V125	$\gamma$ CH (wag.) + $\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	828	0.000
V126	$\gamma$ CH (wag.) + $\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	828	0.000
V127	$\gamma$ CH (wag.) + $\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	706	0.000
V128	$\gamma$ CH (wag.) + $\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	706	0.000

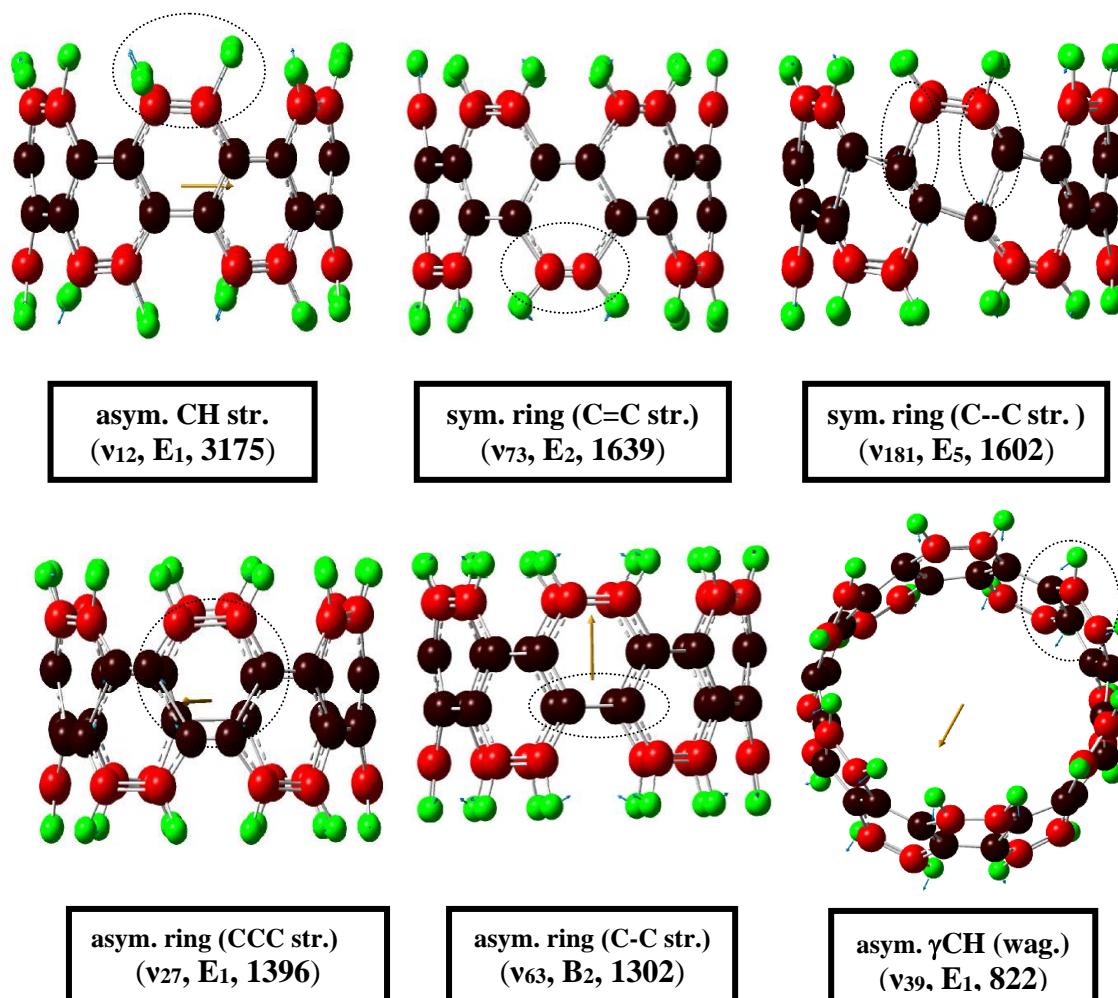
V129	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) + $\gamma$ CH (wag.)	689	0.000
V130	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) + $\gamma$ CH (wag.)	689	0.000
V131	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	564	0.000
V132	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	564	0.000
V133	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	500	0.000
V134	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	500	0.000
V135	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	362	0.000
V136	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	362	0.000
V137	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	149	0.000
V138	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	149	0.000
V139	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	100	0.000
V140	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	100	0.000
<b>E<sub>4</sub></b>			
V141	CH str.	3074	0.000
V142	CH str.	3074	0.000
V143	CH str.	3055	0.000
V144	CH str.	3055	0.000
V145	ring (C=C str.)	1614	0.000
V146	ring (C=C str.)	1614	0.000
V147	ring (C--C str.) + $\delta$ CH (rock.)	1557	0.000
V148	ring (C--C str.) + $\delta$ CH (rock.)	1557	0.000
V149	ring (C--C str.) + $\delta$ CH (rock.)	1430	0.000
V150	ring (C--C str.) + $\delta$ CH (rock.)	1430	0.000
V151	ring (C-C str.) + $\delta$ CH	1315	0.000
V152	ring (C-C str.) + $\delta$ CH	1315	0.000
V153	$\delta$ CH (sciss.)	1251	0.000
V154	$\delta$ CH (sciss.)	1251	0.000
V155	$\delta$ ring (CCC) + $\delta$ CH	1167	0.000
V156	$\delta$ ring (CCC) + $\delta$ CH	1167	0.000
V157	$\gamma$ CH (twist.)	992	0.000
V158	$\gamma$ CH (twist.)	992	0.000
V159	$\delta$ ring (CCC) + $\delta$ CH (rock.)	947	0.000
V160	$\delta$ ring (CCC) + $\delta$ CH (rock.)	947	0.000
V161	$\gamma$ CH (wag.)	823	0.000
V162	$\gamma$ CH (wag.)	823	0.000
V163	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	804	0.000
V164	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC)	804	0.000
V165	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) + $\gamma$ CH (wag.)	660	0.000
V166	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) + $\gamma$ CH (wag.)	660	0.000
V167	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) + $\gamma$ CH (wag.)	566	0.000
V168	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) + $\gamma$ CH (wag.)	566	0.000
V169	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) (elongation)	506	0.000
V170	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) (elongation)	506	0.000
V171	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	280	0.000
V172	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	280	0.000
V173	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	204	0.000
V174	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) (puckering)	204	0.000

V <sub>175</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) ( <b>puckering</b> )	62	0.000
V <sub>176</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) ( <b>puckering</b> )	62	0.000
<b>E<sub>s</sub></b>			
V <sub>177</sub>	CH str.	3080	0.000
V <sub>178</sub>	CH str.	3080	0.000
V <sub>179</sub>	CH str.	3048	0.000
V <sub>180</sub>	CH str.	3048	0.000
V <sub>181</sub>	ring (--C=C str.)	1602	0.000
V <sub>182</sub>	ring (--C=C str.)	1602	0.000
V <sub>183</sub>	ring (--C=C str.)	1544	0.000
V <sub>184</sub>	ring (--C=C str.)	1544	0.000
V <sub>185</sub>	ring (CCC str.) + $\delta$ CH	1456	0.000
V <sub>186</sub>	ring (CCC str.) + $\delta$ CH	1456	0.000
V <sub>187</sub>	$\delta$ CH (sciss.) + ring (CCC str.)	1292	0.000
V <sub>188</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) + $\delta$ CH (sciss.)	1292	0.000
V <sub>189</sub>	$\delta$ CH (sciss.) + ring (CCC str.)	1229	0.000
V <sub>190</sub>	$\delta$ CH (sciss.) + ring (CCC str.)	1229	0.000
V <sub>191</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC)	1155	0.000
V <sub>192</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC)	1155	0.000
V <sub>193</sub>	$\gamma$ CH (twist.)	989	0.000
V <sub>194</sub>	$\gamma$ CH (twist.)	989	0.000
V <sub>195</sub>	$\gamma$ CH (twist.)	972	0.000
V <sub>196</sub>	$\gamma$ CH (twist.)	972	0.000
V <sub>197</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) (elongation)	867	0.000
V <sub>198</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) (elongation)	867	0.000
V <sub>199</sub>	$\gamma$ CH (wag.)	810	0.000
V <sub>200</sub>	$\gamma$ CH (wag.)	810	0.000
V <sub>201</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ C=C) ( <b>puck.</b> ) + $\gamma$ CH (twist.)	615	0.000
V <sub>202</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ C=C) ( <b>puck.</b> ) + $\gamma$ CH (twist.)	615	0.000
V <sub>203</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ C-C) + $\gamma$ CH (wag.)	584	0.000
V <sub>204</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ C-C) + $\gamma$ CH (wag.)	584	0.000
V <sub>205</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC)(clock & anticlockwise)	471	0.000
V <sub>206</sub>	$\delta$ ring ( $\delta$ CCC) (clock & anticlockwise)	471	0.000
V <sub>207</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) ( <b>puckering</b> )	336	0.000
V <sub>208</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ CCC) ( <b>puckering</b> )	336	0.000
V <sub>209</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ C=C) ( <b>puckering</b> )	187	0.000
V <sub>210</sub>	$\gamma$ ring ( $\gamma$ C=C) ( <b>puckering</b> )	187	0.000

Scaling factors: 0.96 (CH str.) for all DFT (B3LYP/6-311G) frequencies, [22].

$\gamma$ : Out of plane of the molecule.,  $\delta$ : In- plane of the molecule.

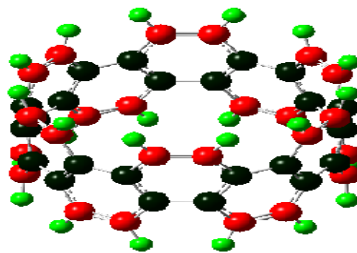
(breath.): ring breathing mode التنفسية., (puck.): ring puckering mode. الانبعاجية., (rock.): CH rocking mode. التنارجحية.  
(sciss.): CH scissoring mode. المقصية., (twist.): CH twisting mode. الالتوائية., (wag.): CH wagging mode. التنارجحية.



شكل (4): الاشكال البيانية الواصفة لبعض أنماط الحركة الاهتزازية لجزيئة [6] سايكلاسين (Armchair)، كما تم حسابها وفق طريقة الحساب DFT و باستخدام برنامج Gaussian 3.

جدول (3): مقارنة ترددات الاهتزاز (cm-1) لجزيئة [6] سايكلاسين Armchair مع ترددات الاهتزاز المناظرة في جزيئة الفينانثرين المسطحة Planar.

Molecule	C-H sym.	C-H asym.	C---Ca sym.	C---Ca asym.	C---Cc sym.	C---Cc asym.	$\delta$ CH sym.	$\delta$ CH asym.	$\gamma$ CH sym.	$\gamma$ CH asym.
[6] Cyclacene armchair $D_{6d}$ 	3067 $A_{1g}$	3055 $B_{1g}$	1531 $A_{1g}$	1457 $B_{1u}$	-----	1411 $B_{1g}$	1222 $A_1$	1274 $B_{2g}$	956 $A_{1g}$	936 $E_{1g}$
Phenanthrene ( $C_{2v}$ ) 	3209 $A_1$	3198 $B_2$	1644 $A_1$	1656 $B_1$	1662 $A_1$	-----	1341 $A_1$	1328 $B_2$	1005 $A_2$	1021 $B_1$



Atom	Electronic charge	
	-0.160-(0.160)	
C	-0.132	■
H	0.160	■
C	-0.027	■

(شكل 5): توزيع الشحنة الالكترونية على ذرات جزيئة [6]سايبكلاسين (Armchair)، وتبعاً للشكل التماثلي لها (D6d)، كما تم حسابها وفق طريقة الحساب DFT، و باستخدام برنامج Gaussian 03.

## DFT CALCULATED FOR VIBRATION FREQUENCIES AND IR ABSORPTION INTENSITIES OF [6] CYCLACENE (ARMCHAIR) MOLECULE

REHAB M. KUBBA

### ABSTRACT.:

The (3N-6) vibration frequencies and IR-absorption intensities of [6] Cyclacene (Armchair) (D6d) molecule were calculated applying Density Functional Theory (DFT) of the type (B3LYP) and a Gaussian basis (6-311G) method. Comparison of the results showed that for the C-H stretching vibrations, the sym. mode shows higher frequency values than the asym. The reverse was found for C-C stretching vibrations., and the following relations hold:

$$\text{sym.CH str.} > \text{vasym. CH str.}$$

$$\text{and, in general :vsym CC str.} < \text{vasym. CC str.}$$

$$\nu \text{ C=C str. (circum.)} > \nu \text{ C--C str. (axial.)} > \nu \text{ C-C str. (circum.)}$$

where's: vsym (C=C str.) < vasym (C=C str.) Circumference , vsym (C--C str.) < vasym (C--C str.) axial , vsym (C-C str.) < vasym (C-C str.) Circumference

Assignment and determined with accurately, were done for all modes of vibration related to puckering, breathing and clock-anticlock bending vibrations.

Also calculations and studying the distribution of charge density on the atoms of the molecule. The results agree with the others in the literature, and with the physical properties and conductivity of tubes constructed from similar molecules.