P- ISSN 1991-8941 , E-ISSN 2706-6703
2011 ,(5), (2) :49-63

(*JUAPS*) **مجلة جامعة الانبار للعلوم الصرفة**

Open Access

حسابات ترددات اهتزاز و شدد امتصاص طيف الاشعة تحت الحمراء لجزيئة [6] سايكلاسين (Chiral)

رحاب ماجد كبة

جامعة بغداد- كلية العلوم

معلومات البحث:
تاريخ التسليم: 2010/10/17
تاريخ القبول: 2011/2/14
تاريخ النشر: / / 2022

DOI: 10.37652/juaps.2011.15271

الكلمات المفتاحية:
ترددات اهتزاز ،
شدد امتصاص ،
طيف الاشعة تحت الحمراء ،
[6] سايكلاسين (Chiral).

الخلاصة:

تم حساب ترددات الاهتزاز وشدة امتصاص طيف الاشعة تحت الحمراء، لجميع الاحداثيات الداخلية لجزيئة [6] سايكلاسين نوع (Chiral) الحلزونية ذات الشكل التماثلي (D3d)، و بعددها (3N–6) ومناقشتها تماثليا و تأصريا وفق نظرية دوال الكثافة (DFT) وباسلوب (B3LYP) وعناصر قاعدة (6-311G).

وعند مقارنة نتائج الحسابات، وجد بأن ترددات الاهتزاز للانماط المتماثلة لحركات المط التآصرية للاواصر C-H أعلى من تلك غير المتماثلة والعكس لاواصر C-C، و تكون ترددات الاهتزاز المتماثلة للحركات الانثنائية (δCH) و (δCC) أعلى من نظائرها غير المتماثلة. ويمكن تلخيص هذه العلاقات بالاتي:

νsym.CH str. > νasym. CH str. ، νsym CC str. < νasym. CC str. ، ν C=C str. (circum.) > ν C--C str. (axial.) > ν C-C str. (circum.)

وان:

νsym. δCH > νasym. δCH ، νsym. γCH < νasym. γCH ، δCH (rocking) > δCH (scissoring)
γCH (twisting) > γCH (wagging)

حيث (C-Caxial) هي اطوال اواصر كاربون كاربون المتجهه على طول المحور العمودي في الجزيئة، اما (C-Cc) فهي اطوال اواصر كاربون–كاربون المتجهه على طول محيط الجزيئة. كما تم و بدقة تعيين جميع ألانماط الاهتزازية العائدة للحركات الانبعاجية و التنفسية والانحنائية باتجاه وعكس اتجاه عقرب الساعة، والتي تعود اليها التشوهات الحاصلة من جراء الاهتزاز. أيضا تم حساب و دراسة توزيع الشحنة الالكترونية على ذرات هذه الجزيئة.

المقدمة

تتكون أنابيب النانوكاربون أحادية الطبقة المفردة (Single Wall Carbon Nanotube) من حلقات البنزين السداسية متصلة مع بعضها البعض بشكل طوق، و تكون طريقة ترتب الحلقات السداسية تبعا للمحورالسيني للانبوب [1-5].

وقد تم تحضير انابيب النانوكاربون (CNTs)بطرائق مختلفة منها طريقة التفريغ الكهربائي لقطب الكرافيت و تحت ضغط من غاز الهليوم، بوجود عوامل مساعدة مثل (Fe أو Co أو Ni) [6,1]. وطريقة التحلل الحراري للهيدروكاربون بوجود عامل مساعد مثل (Ni أو Co) [7]. وطريقة تبخر الكرافيت باستعمال الليزر [8]. وطريقة

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

التحلل الالكتروليتي لقطب الكرافيت في منصهر ملحي (Moltten salt) [9, 10].

وتمت دراسة الخواص الالكترونية لهذه الأنابيب نظريا بطرائق تتعلق بميكانيك الكم وعلى وفق فيزياء المادة، والميكانيك الستاتيكي [11]. وكذلك درس العالم (Hamada) ومجموعته الخواص الالكترونية لأنابيب النانوكاربون نظريا، وبين اعتماد صفاتها بصورة رئيسة على الأقطار (Radius) والكيرالية (Chirality) والى مجموعة النقطة (Point group) [12].

وتمت أيضا دراسة علاقة القوة المثالية لأنابيب النانوكاربون بقطر الأنبوب (d)، وبأطوال أواصر (C–C) المتجهة على طول المحور العمودي في أنابيب النانوكاربون أحادية الطبقة (C-Caxial)، وكذلك أطوال أواصر (C–C) المتجه على طول محيط انبوب النانوكاربون أحادي الطبقة (C- Cc) (شكل–1)[13] .

أما في ما يتعلق بحسابات و دراسة ترددات الاهتزاز في أنابيب النانوكاربون، يجب فهم طبيعة أنماط الحركات الاهتزازية في هذه الأنابيب، ودراسة تأثيرها في تشوه شكل الأنبوب وعلاقة هذا التشوه المباشرة مع قابلية التوصيل الحراري والالكتروني، حيث وجد ان تشوه شكل الأنبوب يؤدي الى التغير في الخاصية الالكترونية والميكانيكية لأنبوب النانوكاربون، (شكل–2) [14].وقد وجد تجريباً أن هناك ثلاثة أنماط أساسية من ترددات الاهتزاز لأنابيب النانوكاربون أحادية الطبقة التي لها التأثير المباشر في خواصها التوصيلية، هي: أنماط الاهتزاز التنفسية (breathing)، وأنماط انحناء الجزيئة مع وعكس عقرب الساعة (clock & anticlockwise) وأنماط الانبعاج (puckering)، [15].

وأثبتت هذه الدراسات أن ترددات الأنماط الاهتزازية الفعالة في طيف الأشعة تحت الحمراء تعتمد على الأقطار و الكيلرالية، ونوع الأنبوب، وطول الأنبوب، مع الأخذ بعين الاعتبار التماثل لأنابيب النانوكاربون [16]. وتعد هذه الدراسات بصمات أصبع لطيف امتصاص الأشعة تحت الحمراء، والهدف منها تفسير وفهم الصفات المميزة لأنابيب النانو كاربون كاستقرارها، و توصيلها الكهربائي العالي وامكانية الاستفادة منها في التطبيقات الصناعية [17].

كما تمت دراسة تأثير التشوهات والعيوب في الحركة الاهتزازية وفي الخواص الالكترونية لأنابيب النانوكاربون (CNTs)[18]بنجاح في بحوث معهد ماكس بلاك للحالة الصلبة لحساب الأنماط الاهتزازية لهذه الأنابيب النانوية، وذلك باستخدام تقنية المسح الميكروسكوبي الأنبوبي الذي يعمل في درجة حرارة 6K كلفن. وبينت الدراسة أن التشوهات الحاصلة من جراء الاهتزاز عند بعض أنماط الحركة الاهتزازية قد تزيد قوة التشوه في الذرات المجاورة، وتقلل بدورها من قابلية التوصيل الحراري للأنبوب وقدرته لسريان الحرارة [19,20].

و لا يوجد في الأدبيات مايشير إلى التصنيف التماثلي والتكافؤي التام لترددات الاهتزاز و بعدد 3N-6 لأمثال هذه الجزيئة أو لأنابيب النانوكاربون نوع (Chiral) المتشاكلة منها، رغم كل ماورد عن أهمية دراسة الحركات الاهتزازية وتصنيفها وطبيعتها في هذه الانابيب، لذا قمنا بهذه الدراسة و تعد حساباتنا تنبؤية تامة

النتائج والمناقشة:.

جزيئة [6] سايكلاسين نوع (Chiral) الحلزوني، شكلها حلقي تتكون من ارتباط الجزيئات االحلقية السداسية بشكل مائل حلزوني. تم حساب الشكل الهندسي التوازني على وفق طريقة الحساب لنظرية دوال الكثافة (DFT) [21] وباسلوب (B3LYP) [22] وعناصر قاعدة (6-311G) [23]، وقد وجد امتلاكها للشكل التماثلي (D3d) وفقا لنظرية المجموعة [24]، (شكل–3). وتبعا لهذا التماثل،

تم حساب حرارة التكوين والاحداثيات الهندسية الداخلية (اطوال و زوايا التاصر) للمقطع المتكرر فيها (شكل–4)، مع بعض الخواص الفيزيائية عند الشكل الهندسي المتوازن، (جدول –1).

ويلاحظ فيه أن أقصر الاواصر تعود الى الاواصر المحيطية كالاصرة (C6-C11) الثنائية وبالتالي فانها أقوى الاواصر وثوابت القوى لترددتها هي الاكبر، تليها أطوال ألاواصر المحورية كالاصرة المنفردة (C3-C6) وألاواصر المحورية المقترنة كالاصرة (C1-C2، ثم الاواصر المحيطية الداخلية كالاصرة (C7-C12) المنفردة هي أطول ألاواصر وأضعفها وثوابت القوى لترددتها هي الاقل وينسجم هذا مع قيم ترددات اهتزاز المط لهذه الاواصر و العلاقات بينها جدول (2).

تصنيف ترددات الاهتزاز

تمتلك جزيئة [6] سايكلاسين نوع Chiral، (210) نمطاً اهتزازياً من الترددات الاساسية Fundamental vibration وبعدد (3N–6). وتم استخراج العدد الكلي للاصناف التماثلية .Γtot مع استخراج الاصناف التماثلية غير القابلة للاختزال وتساوي 216 نمطا اهتزازيا.

3N = 3 × 72 = 216= 18A1g + 6Eg + = Γtot.

18A2u + 36Eu + 17A2g + 18A1u+ A2g

هنالك ثلاث من هذه الانماط دورانية [(zR)، (yR، xR) Eg] وثلاث اخرى انتقالية [A2u(zT)، Eu (yT،xT)]، يصبح عدد درجات الحرية الاهتزازية Γvib مساوياً الى (210):

Γvib .= Γtot. - (Γrot + Γtra) = 3N–6

18A1g + 35Eg + 210 = Γvib . = 216- 6 =

17A2u + 35Eu + 17A2g + 18A1u

ومن جدول القيم الذاتية [17] تم تحديد عدد الانماط الاهتزازية الفعالة في طيف الاشعة تحت الحمراء فقط وعددها 87 نمطا اهتزازيا (17A2u + 35Eu)، وتحديد عدد الانماط الاهتزازية الفعالة في طيف رامان فقط، وعددها 88 نمطا اهتزازيا 35Eg(depolarized) و18A1g(polarizad). أما الانماط غير الفعالة في كلا الطيفين فعددها 35 نمطا اهتزازيا (17A2g + 18A1u). وقد تم تصنيف جميع هذه الانماط وعلى النحو الاتي:

ترددات مط الاصرة CH

(CH stretching vibrations)

وعددها 24 نمطاً اهتزازياً بعدد اواصر (C-H) وتتمركز متجهات الازاحة لها عند ذرات الهيدروجين لاواصر (CH)، وتتراوح القيم العددية لترددتها الناتجة من الحساب بين (3032–3057) سم–1، وبالتدقيق في (جدول –2)، يلاحظ أن أعلى شدة 38.908 كم/مول وتعود للنمط ν194(A2u) عند التردد 3055 سم–1. كما ويمكن ملاحظة العلاقة الاتية:

νsym (CH str.) (3057 cm-1) > (A1g)

νasym (CH str.) (3054 cm-1) (Eg)

– ترددات مط اصرة C–C الحلقية

Ring CC stretching vibrations(CCstr.)

وتتراوح القيم العددية لترددتها الناتجة من الحساب بين (1342–1638) سم–1، وبالتدقيق في (جدول–2) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة 9.122 كم/ مول وتعود للنمط ν117(Eu) عند التردد 614 سم–1 كما و ويمكن ملاحظة العلاقات الاتية:

νsym (C=C str.) (1637 cm-1) < ν3 (A1g)

νasym (C=C str.) (1642 cm-1)

ν45(Eg) (circum.)

(C--C str.) (1602 cm-1) <

ν4 (A1g)

νasym(C-Cstr.) (1642 cm-1)

ν21(A1u) (axial)

و بصورة عامة:

لاتتمركز متجهات ازاحات المط فيها عند ذرات كاربون اواصر محددة، و تتراوح قيم ترددااتها المحسوبة بين (1358– 1454) سم–1. وبالتدقيق في (جدول–2) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة 40.909 كم/ مول وتعود للنمط ν119(Eu) عند التردد 1537 سم–1. كما و ويمكن ملاحظة العلاقة الاتية:

νsym. (CCC str.) (1454 cm-1) >

ν5 (A1g)

νasym. (CCC str.) (1409 cm-1)

ν_{198} (A_{2u})

– ترددات انحناء الاصرة CH

تتراوحThe CH bending vibrations (δCH)

قيم ترددااتها المحسوبة بين (1164– 1484) سم–1. وبالتدقيق في (جدول–2) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة 37.368 كم/ مول وتعود للنمط ν199(A2u) عند التردد 1346 سم–1.

νsym.يمكن ملاحظة العلاقات الاتية: وبصورة عامة

δ(--CH) (rock.) >

νsym. δ(--CH) (sciss.)

νsym. δ(--CH) (sciss.) >

νsym. δ(=CH) (sciss.)

νasym. δ(=CH) (rock.) >

νasym. δ(=CH) (sciss.)

– ترددات انحناء أواصر CCC الحلقية

Ring bending vibrations (δCCC)

ν (C-C str.) (circum.) <

ν (C--C str.) (axial.) <

ν (C=C str.) (circum.)

ترددات مط اواصر CCC الحلقية Ring CCC

stretching vibrations (CCC str.)لاتتمركز

متجهات ازاحات المط فيها عند ذرات

1.) سم–833–351وتتراوح قيم ترددااتها المحسوبة بين (

11.095) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة 2وبالتدقيق في (جدول–

. كما 1سم–1221 عند التردد ν200(A2u)كم/مول وتعود للنمط

ويمكن ملاحظة العلاقة الاتية:

νsym (δCCC) (1102 cm-1) >

νasym (δCCC) (833 cm-1)

ترددات انحناء الاصرة γCH

γCH bending vibrations

و 1.) سم–997–682تتراوح قيم ترددااتها المحسوبة بين (

195.524) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة 2بالتدقيق في (جدول–

. كما 1سم– 928 عند التردد ν144(Eu)كم/ مول وتعود للنمط

ويمكن ملاحظة العلاقات الاتية:

νasym. γ(=CH) (twist.) circum. >

νasym. γ(--CH) (twist.) (axial.)

νsym. γ(=CH) (wag.) circum. <

νasym. γ(--CH) (twist.) (axial.)

νsym. γ(=CH) (wag.) circum. <

νsym. γ(--CH) (wag.) (axial.)

-ترددات الانحناء الحلقية (γCCC)

1 سم–(45-765)وتتراوح قيم ترددااتها المحسوبة بين

للانماط الفعالة في طيف الاشعة تحت الحمراء. و بالتدقيق في (جدول–

كم/ مول وتعود للنمط 5.532) يمكن ملاحظة أن أعلى شدة 2

. ويمكن ملاحظة العلاقة 1سم−629 عند التردد ν207(A2u) الاتية:

ν sym. (γCCC) (616 cm-1) < (A1g)
ν asym. (γCCC) (765 cm-1) (A1u)

وقد جاءت قيم الترددات المحسوبة قريبة من قيم البعض منها المحسوبة نظرياً (ودون التصنيف التام بعدد (3N-6) على وفق طريقة (DFT) لانابيب النانو التي وحدة بنائها أمثال هذه الجزيئة [16] .

ويوضح جدول (2) ترددات وشدد امتصاص الاشعة تحت الحمراء بعدد 3N-6 متضمنة الاصناف الفعالة في طيف الاشعة تحت الحمراء (شدة الامتصاص لها (0.0 ≠)، والاصناف غير الفعالة في طيف الاشعة تحت (شدة الامتصاص لها (0.0 =))، مع التصنيف التكافؤي و التماثلي لها وفق نظرية المجموعة، و وفق هيرزبرك لتسلسل الانماط التماثلية [25].

ويبين (شكل -5)، الاشكال البيانية الواصفة لبعض أنماط الحركة الاهتزازية لجزيئة [6] سايكلاسين نوع Chiral، كما تم حسابها على وفق طريقة الحساب DFT وباستخدام برنامج Gaussian 03.

وعند مقارنة ترددات الاهتزاز لهذه الجزيئة مع الترددات المناظرة لها في جزيئة الفينانثرين الاروماتية المسطحة Planar ذات التماثل (C2v) والتي تم حسابها بنفس طريقة واسلوب وعناصر قاعدة الحساب (DFT (B3LYP/ 6-311G)، (جدول−3)، يلاحظ أن قيم ترددات الاهتزاز لجزيئة السايكلاسين أوطأ من الترددات المقابلة لها 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، تؤكده حرارة

δ:الحركة الانحنائية في مستوى سطح الجزيئة (عند مستوى الطوق الحلقي).

δ: In- plane of the molecule.

γ: الحركة الانحنائية خارج مستوى سطح الجزيئة (خارج مستوى الطوق الحلقي)

γ: Out of plane of the molecule.

التكوين المحسوبة لها (ΔHf = 304.821 kcal/mol) التي هي أكبر بكثير من حرارة التكوين المحسوبة لجزيئة الفينانثرين (ΔHf = 54.864 kcal/mol) وفق نفس طريقة الحساب، و يعزى ذلك الى الشد الحلقي المتسبب عند لف الحلقات الاروماتية بغرض تكوين الطوق الحلقي لجزيئة السايكلاسين. وأخيرا تمت دراسة توزيع الشحنة الالكترونية على ذرات هذه الجزينة حيث وجد تمركزها بصورة رئيسة عند ذرات الكاربون المحيطية C-Cc (ذات الشحنات السالبة) و عند ذرات الهايدروجين (ذات الشحنات الموجبة)، في حين تتضائل عند ذرات الكاربون البعيدة عن الحواف الخارجية للجزيئة. ويتضح هذا في الشكل (6) حيث يلاحظ ان الشحنة الالكترونية على ذرات كاربون الحافة الخارجية لجزيئة السايكلاسين اكبر سالبية والتي وجدت مساوية الى (-0.166) عند ذرتي كاربون الاصرة المزدوجة المحيطية، وهذه اكبر سالبية من الشحنات على ذرات الكاربون عند الحافة الى الداخلية والمرتبطة بالاواصر المقترنة المحورية (−0.147)، تليها ذرات الكاربون بين ذرتي الكابون الطرفية (−0.025)، ثم ذرات الكاربون الداخلية المحيطية (−0.012). 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)، وكذلك تتوافق هذه النتائج مع ماشير اليه في الادبيات حول طبيعة توزيع الشحنة الالكترونية في أنابيب النانوكاربون [27-29]، من أن

الشحنات الالكترونية تنتقل ميكانيكياً في انابيب النانوكاربون بين الاغلفة الخارجية من انبوب الى الاخر، ومع النتائج التي تم الحصول عليها عند حساب توزيع الشحنة الالكترونية لجزيئات سايكلاسين بأنواع اخرى (Zig zag و Armchair) باستخدام حسابات ميكانيك الكم شبه التجريبية (MINDO/3) و (PM3) [30].

المصادر

1- a- Iijima S. (1991). Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* 354, 56–58. b- Iijima S, Ichlhashi T. (1993). Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *Nature* ; 363: 603–5.

2- Carroll, D. L. et al. (1997). Electronic structure and localized states at carbon nanotube tips. *Phys. Rev. Lett.* ; 78: 2811–2814.

3- Iijima S, Brabec C, Maiti A, Bernholc J. (1996) Structural flexibility of carbon nanotubes. *J. Chem. Phys.*; 104(5): 2089–92.: O. Hofmann, G. Voirin, P. Niedermann and A. Manz, (2002). *Anal. Chem.* 74, 5243.

4- Saito, R., Fujita, M., Dresselhaus, G. and Dresselhaus, M. S. (1992). Electronic structure of chiral graphene tubules. *Appl. Phys. Lett.*; 60: 2204–2206.

5- Erik T. Thostenson, C.L., Tsu-Wei Chou,. (2005). Nanocomposites in context. Composites. *Science and Technology.*; 65: 491-516.

6- E. Flahaut, A. Govindaraj, A. Peigney, C. Laurent, C.N. Rao, (1999). Synthesis of single-walled carbon nanotubes using binary (Fe, Co, Ni) alloy nanoparticles prepared in situ by the reduction of oxide solid solutions, *Chem. Phys. Lett.* ;300 : 236–242.

7- Ge M, Sattler K. (1994). Bundles of carbon nanotubes generated by vapor-phase growth. *Applied Physics Letters*; 64 (6): 710–1.

8- J. Kong, H. Soh, A. Cassell, C.F. Quate, H. Dai, (1998). Synthesis of individual single-walled carbon nanotubes on paterned silicon wafers, *Nature*.; 395: 878.

9- J. Jiao, S. Seraphin, X.K. Wang and J.C. Withers, J. Appl. Phys. 80, 103, (1996).

10- W.K. Hsu, M. Terrones, J.P. Hare, H. Terrones, H.W. Kroto and D.R.M. Walton Chem. Phys. Lett. 262, 161, (1996).

11- N. Anderson, A. Hartschuh, S. Cronin and L. Novotny, J. Am. Chem. Soc. 127, 2533-2537, (2005).

12- Hamada, N., Sawada, S. and Oshiyama, (1992). A. New one-dimensional conductors: graphitic microtubules. *Phys. Rev. Lett.* ;68 :1579-1581.

13- Imtani A.N. and Jinal V.K. (2006). Bond Lengths of Single-Walled Carbon Nanotubes. Department of Physics, Panjab University, Changdigrah-160014, India;1-11.

14- a- A. Rochefort, P. Avouris, J. Phys. Chem. A 104, 9807–9811, (2000); L. Chico, L.X. Benedict, S.G. Louie, M.L. Cohen, Phys. Rev. B 54, 2600–2606 (1996); P.E. Pehrsson, W. Zhao, J. W. Baldwin, C. H. Song, J. Liu, S. Kooi and B. Zheng, J. Phys. Chem. B 107, 5690–5695 (2003).

15- A.B. Dalton, J.N. Coleman, B. McCarthy, P.M. Ajayan, S. Lefrant, P. Bernier, W. Blau and H.J. Byme, J. Phys. Chem. B. 104, 1012, (2000).

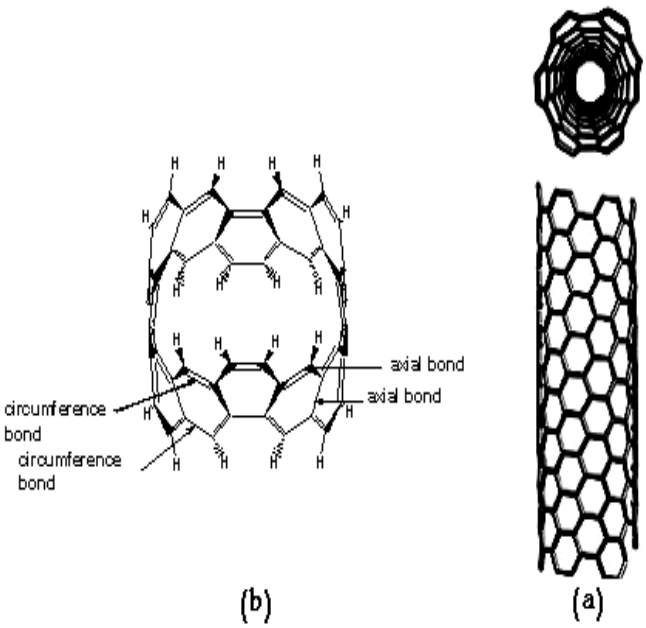
16- K.A. Ramani and H. Chadl, (2006). Infrared spectroscopy of SWCNTs. *J. phys.chem.* ;B.110(25) :12388-12393.

17- Ruoff RS, Lorents DC. (1995). Mechanical and thermal-properties of carbon nanotubes. Carbon; 33(7): 925–30.

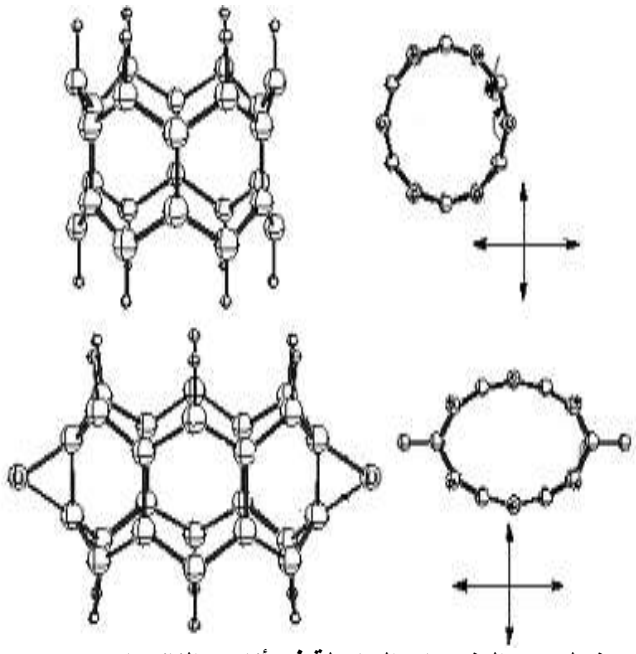
18- Vitali L., Bughard M., Schneider M.A., LeiLiu Y.Wu., Jayanthi C. and Kem K. (2004). Photon Spectromicroscopy of Carbon Nanostructures with Atomic Resolution. *Phys. Rev. Lett.*; 93:136103.

19- U. Kuhlman, H. Jantoljak, N. Pfander, P. Bernier, C. Journet and C. Thomsen, Olk, C. H. & Heremans, J. P. (1994). Scanning tunneling spectroscopy of carbon nanotubes. J. Mater. Res. 9, 259–262.

Thesis, College of Science, University of Baghdad., **(2009).**



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



(شكل-2): التشوهات الحاصلة في أنابيب النانوكاربون بسبب الحركات الاهتزازية .

20- Science direct-surface science Reports; (2005). Electronic and Vibrational properties of chemically modified (SWCNTs), Article Tool book, *Max-plank-Institutfuer*, Germany, vol. 58, Issues 4, p. 1-5, August.

21- W. Kohn, and L. J. Sham, (1964). *Phys. Rev*., 140, A1133-A1138 (1965), P. Hohenberg, and W. Kohn, Phys. Rev., 136, B864-B871.

22- R. G. Parr and W. Yang, (1989). Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. *Oxford, New York*, p. 53.

23- 311G, See G03, User"s Manual, Gaussian, Inc. Pittsburgh, PA, 2003.

24- G. Davidson, (1990). Introduction to group theory for Chemists, *Applied Science Publishers Ltd. London*, Elsevier Publishing Comp. Ltd.

25- G. Herzberg, (1971). Molecular Spectra and Molecular Structure, Infrared and Raman spectra of Polyatomic Molecules, *Van Nostrand Co*, New York.

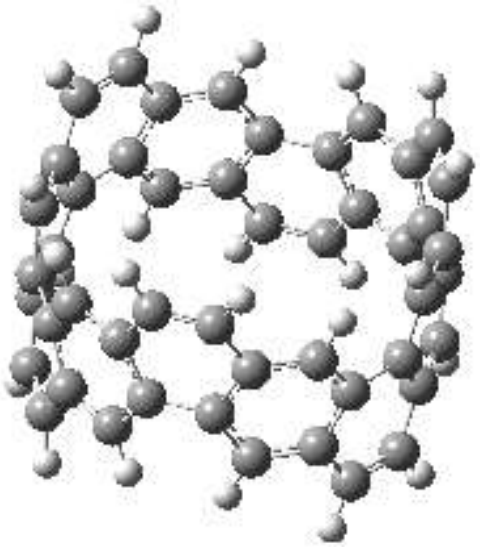
26- Lewars E. (2003) COMPUTATIONAL CHEMISTRY "Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics".,*Chemistry Department, Trent University, Peterborough*, Ontario, Canada.

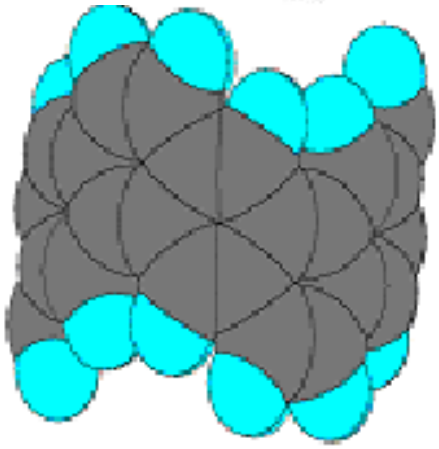
27- Krcmar M., Saslow W.M. and Zangwill A., (2003). Electrostatic of Conducting Nanocylinder, *J. Appl. phys.*; 93 :3495-3500.

28- Odom T.W., Huang J., Kim P. and Lieber C.M. (2000). Structure and electronic properties of CNT. *J. Phy. Che*m. ;104: 2794-2809.

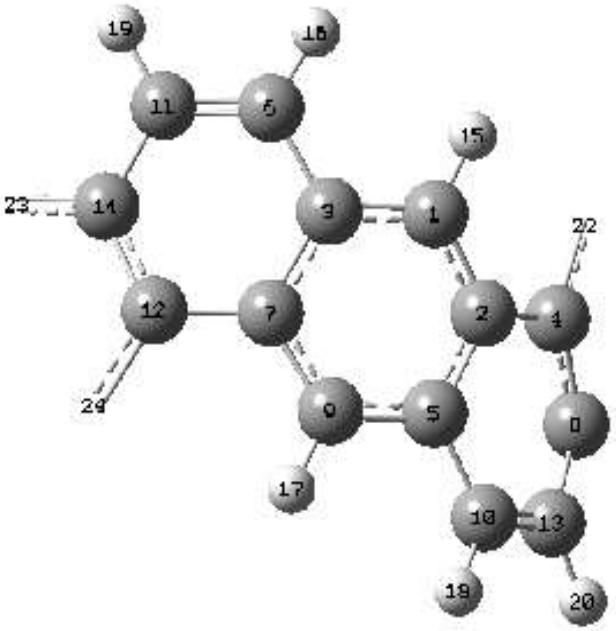
29- Zhang, Z. and Lieber, C. M. (1993). Nanotube structure and electronic properties probed by STM. *Appl. Phys.Lett.* ;62 :2972–2974.

30- H. N. Al-Ani, "Theoretical study of vibration modes for Cyclacene and Collarene molecules (Construction units of carbon nanotubes)", M.Sc.



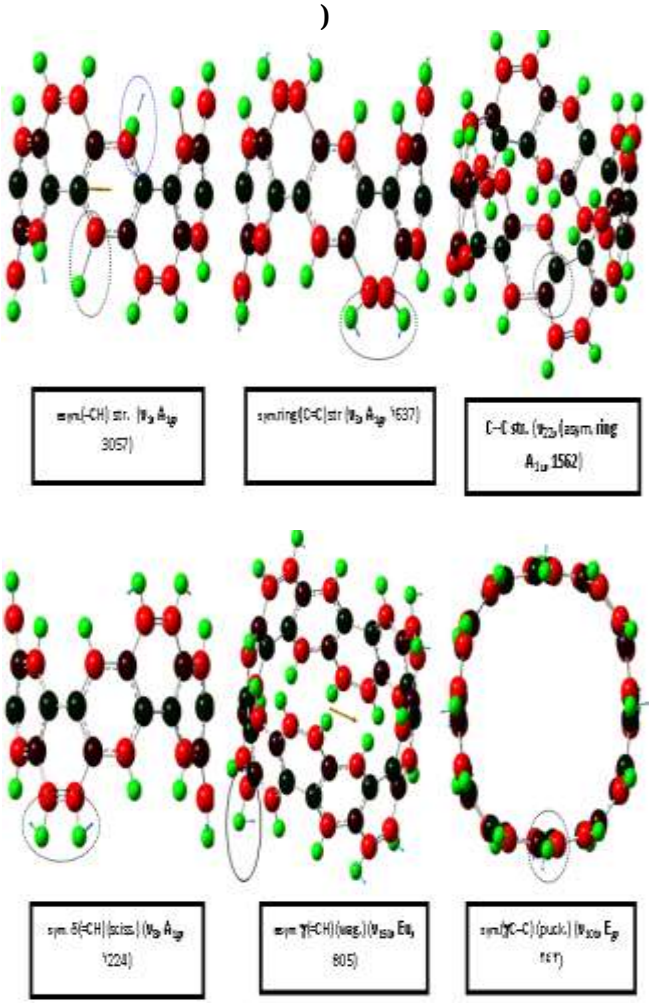


(شكل-3): الشكل الهندسي التوازني لجزيئة [6] سايكلاسين نوع (Chiral).



(شكل-4): مقطع الاواصر والزوايا المتكررة على وفق تماثل الشكل الهندسي الفراغي (D_{3d}) لجزيئة [6] سايكلاسين نوع (Chiral) كما تم حسابه على وفق طريقة الحساب DFT.

)



شكل-5): الاشكال البيانية الواصفة لبعض أنماط الحركة الاهتزازية لجزيئة [6] سايكلاسين نوع Chiral، يوضح تموضع الحركة الاهتزازية عند الترددات المقابلة لها.

(جدول-1): ابعاد وزوايا التآصر لجزيئة [6] سايكلاسين نوع Chiral الحلزونية، مع بعض الصفات الفيزياوية.

Bond length (Å) and Bond angles (deg.)	(DFT) B3LYP/ 6-311G
C_1C_2*	1.404
C_1C_3**	1.403
C_7C_{12}**	1.472

Point group	ΔH_f /mol) (kJ	ΔH_f (kcal/mol)	m. wt. (gm/mol)	Molecular formula	$< C_6C_{11}H_{19}$	$< C_6C_{11}C_{14}$	$< C_3C_7C_{12}$	$< C_3C_7C_9$	$< C_3C_6H_{16}$	$< C_3C_6C_{11}$	$< C_2C_5C_{10}$
D_{3d}	1275.226	304.821	600.718	$C_{48}H_{24}$	120.817	120.186	117.905	117.012	118.637	120.186	118.785

$< C_1C_3C_7$	$< C_1C_3C_6$	$< C_1C_2C_4$	$< C_1C_2C_5$	$< C_2C_1H_{15}$	$< C_2C_1C_3$	C_6H_{16}	C_1H_{15}	C_6C_{11}**	C_5C_9	C_3C_6*	C_2C_5*
119.412	120.540	122.559	117.012	120.073	121.269	1.083	1.082	1.356	1.403	1.449	1.434

A_{1u}			
ν_{19}	(--CH) **str.**	**3042**	**0.000**
ν_{20}	(=CH) **str.**	**3032**	**0.000**
ν_{21}	ring (C--C) **str.**	**1642**	**0.000**
ν_{22}	ring (C--C **str.**)	**1562**	**0.000**
ν_{23}	ring (C-C **str.**)+ δ(=CH)	**1463**	**0.000**
ν_{24}	δCH + ring (C-C **str.**) **(axial)**	**1321**	**0.000**
ν_{25}	δ(=CH) + ring (C--C-C) **str.**	**1244**	**0.000**
ν_{26}	γ(=CH) **(twist.)**	**997**	**0.000**
ν_{27}	γ(--CH) **(twist.)**	**940**	**0.000**
ν_{28}	γ(--CH) **(twist.)**	**890**	**0.000**
ν_{29}	δring (δCCC) **(clock & anticlockwise)**	**833**	**0.000**
ν_{30}	γring (γCCC)) **(puckering)**	**765**	**0.000**
ν_{31}	δring (δC--C--C) **(elongation)**	**664**	**0.000**
ν_{32}	γring (γCCC)) **(puckering)**	**566**	**0.000**
ν_{33}	γring (γCCC)) **(puckering)**	**507**	**0.000**
ν_{34}	δring (δCCC)	**399**	**0.000**
ν_{35}	γring (γCCC)) **(puckering)**	**378**	**0.000**
ν_{36}	γring (γCCC)) **(puckering)**	**123**	**0.000**
E_g			
ν_{37}	CH **str.**	**3054**	**0.000**
ν_{38}	CH **str.**	**3054**	**0.000**
ν_{39}	CH **str.**	**3053**	**0.000**
ν_{40}	CH **str.**	**3053**	**0.000**
ν_{41}	(--CH) **str.**	**3041**	**0.000**
ν_{42}	(--CH) **str.**	**3041**	**0.000**
ν_{43}	(=CH) **str.**	**3032**	**0.000**
ν_{44}	(=CH) **str.**	**3032**	**0.000**
ν_{45}	ring (C=C) **str.**	**1642**	**0.000**
ν_{46}	ring (C=C) **str.**	**1642**	**0.000**
ν_{47}	ring (C--C) **str.** + (C=C) **str.**	**1633**	**0.000**
ν_{48}	ring (C--C) **str.** + (C=C) **str.**	**1633**	**0.000**
ν_{49}	ring (C--C) **str. (axial)**	**1552**	**0.000**
ν_{50}	ring (C--C) **str. (axial)**	**1552**	**0.000**
ν_{51}	ring (CCC) **str.** + δ(=CH) **(rock.)**	**1484**	**0.000**
ν_{52}	ring (CCC) **str.** + δ(=CH) **(rock.)**	**1484**	**0.000**
ν_{53}	ring (CCC) **str.** + δ(--CH) **(rock.)**	**1465**	**0.000**
ν_{54}	ring (CCC) **str.** + δ(--CH) **(rock.)**	**1465**	**0.000**
ν_{55}	ring (CCC) **str.** +	**1389**	**0.000**

Length (Å)	**5.545**
Diameter (Å)	**8.757**
HOMO (eV)	**-7.916**
LUMO (eV)	**-1.326**
Dipole moment (Debye)	**0.000**

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

جدول (2): ترددات الاهتزاز و شدة امتصاص الاشعة تحت الحمراء لجزيئة [6] سايكلاسين نوع Chiral .

	Symmetry & description	DFT B3LYP/ 6-311G Freq. cm^{-1}	Intensity km/mol
A_{1g}			
ν_1	CH **str.**	**3057**	**0.000**
ν_2	CH **str.**	**3052**	**0.000**
ν_3	ring (C=C) **str.**	**1637**	**0.000**
ν_4	ring (C--C) **str.**	**1602**	**0.000**
ν_5	ring (CCC) **str.**	**1454**	**0.000**
ν_6	δ(--CH) **(rock.)**	**1321**	**0.000**
ν_7	δ (--CH) **(sciss.)**	**1312**	**0.000**
ν_8	δ(=CH) **(sciss.)**	**1224**	**0.000**
ν_9	δring (δCCC) + δ(=CH) **(sciss.)**	**1102**	**0.000**
ν_{10}	γ(--CH) **(wag.)**	**933**	**0.000**
ν_{11}	γ(=CH) **(wag.)**	**803**	**0.000**
ν_{12}	δring (δC--C--C) **(puck.)**	**756**	**0.000**
ν_{13}	γring (γCCC) **(breath.)** + γCH **(wag.)**	**616**	**0.000**
ν_{14}	γring (γCCC) **(puckering)**	**554**	**0.000**
ν_{15}	γring (γC--C--C) **(breath.)**	**460**	**0.000**
ν_{16}	γring (γCCC) **(breath.)**	**383**	**0.000**
ν_{17}	γring (γCCC) **(breath.)**	**258**	**0.000**
ν_{18}	γring (γC-C=C-C) **(breath.)**	**120**	**0.000**

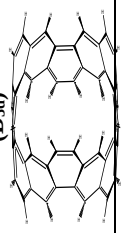
ν_{88}	γring (γCCC) **(puckering)** + γCH **(wag.)**	**673**	**0.000**
ν_{89}	γring (γCCC) **(puckering)**	**579**	**0.000**
ν_{90}	γring (γCCC) **(puckering)**	**579**	**0.000**
ν_{91}	γring (γCCC) **(puckering)** + γCH **(wag.)**	**553**	**0.000**
ν_{92}	γring (γCCC) **(puckering)** + γCH **(wag.)**	**553**	**0.000**
ν_{93}	γring (γCCC) **(puckering)** + γCH	**483**	**0.000**
ν_{94}	γring (γCCC) **(puckering)** + γCH	**483**	**0.000**
ν_{95}	γring (γCCC) **(puckering)** + γCH **(twist.)**	**428**	**0.000**
ν_{96}	γring (γCCC) **(puckering)** + γCH **(twist.)**	**428**	**0.000**
ν_{97}	γring (γCCC) + γCH **(twist.)**	**412**	**0.000**
ν_{98}	γring (γCCC) + γCH **(twist.)**	**412**	**0.000**
ν_{99}	γring(γC-C=C-C) **(pucker.)**+ γ(=CH) **(twist.)**	**287**	**0.000**
ν_{100}	γring(γC-C=C-C) **(pucker.)**+ γ(=CH) **(twist.)**	**287**	**0.000**
ν_{101}	γring (γC--C--C) **(puckering)** + γCH **(wag.)**	**242**	**0.000**
ν_{102}	γring (γC--C--C) **(puckering)** + γCH **(wag.)**	**242**	**0.000**
ν_{103}	γring(γC-C=C-C) **(pucker.)**+ γ(=CH) **(wag.)**	**169**	**0.000**
ν_{104}	γring(γC-C=C-C) **(pucker.)**+ γ(=CH) **(wag.)**	**169**	**0.000**
ν_{105}	γring (γCCC)) **(puckering)**	**45**	**0.000**
ν_{106}	γring (γCCC)) **(puckering)**	**45**	**0.000**
Eu			
ν_{107}	CH **str.**	**3055**	**49.553**
ν_{108}	CH **str.**	**3055**	**49.553**
ν_{109}	CH **str.**	**3053**	**3.673**
ν_{110}	CH **str.**	**3053**	**3.673**
ν_{111}	(--CH) **str.**	**3040**	**4.865**
ν_{112}	(--CH) **str.**	**3040**	**4.865**

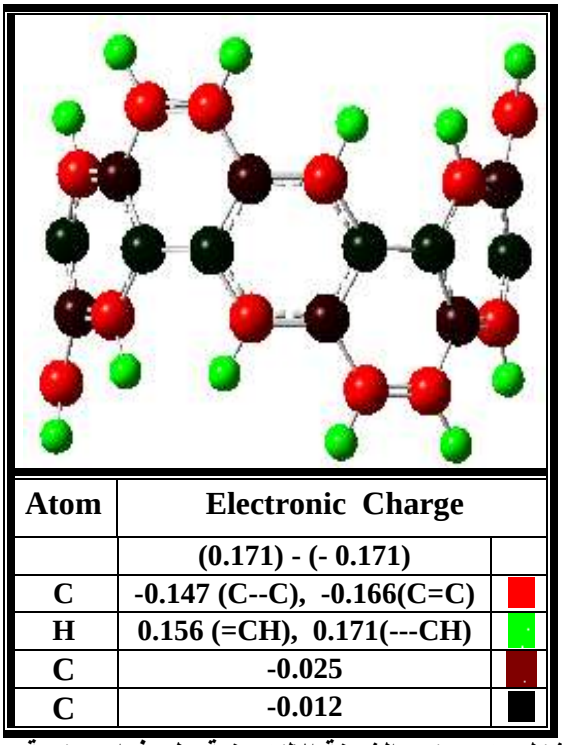
ν_{56}	δ(=CH) **(rock.)** ring (CCC) **str.** + δ(=CH) **(rock.)**	**1389**	**0.000**
ν_{57}	δ(=CH)**(sciss.)**+δ(--CH)**(rock.)**+ (CCC) **str.**	**1355**	**0.000**
ν_{58}	δ(=CH)**(sciss.)**+ δ(--CH)**(rock.)**+(CCC) **str.**	**1355**	**0.000**
ν_{59}	δ(--CH) **(rock.)**	**1321**	**0.000**
ν_{60}	δ(--CH) **(rock.)**	**1321**	**0.000**
ν_{61}	δCH **(rock.)** + δring (δCCC)	**1256**	**0.000**
ν_{62}	δCH **(rock.)** + δring (δCCC)	**1256**	**0.000**
ν_{63}	δ(=CH) **(sciss.)** + δring (δCCC)	**1228**	**0.000**
ν_{64}	δ(=CH) **(sciss.)** + δring (δCCC)	**1228**	**0.000**
ν_{65}	δCH **(sciss.)** + δring (δCCC)	**1208**	**0.000**
ν_{66}	δCH **(sciss.)** + δring (δCCC)	**1208**	**0.000**
ν_{67}	δ(=CH) **(sciss.)**	**1164**	**0.000**
ν_{68}	δ(=CH) **(sciss.)**	**1164**	**0.000**
ν_{69}	γ(=CH) **(twist.)**	**997**	**0.000**
ν_{70}	γ(=CH) **(twist.)**	**997**	**0.000**
ν_{71}	γ(--CH) + γ(=CH) + γ(C=C)	**947**	**0.000**
ν_{72}	γ(--CH) + γ(=CH) + γ(C=C)	**947**	**0.000**
ν_{73}	γ(--CH) **(wag.)**	**915**	**0.000**
ν_{74}	γ(--CH) **(wag.)**	**915**	**0.000**
ν_{75}	γ(--CH) **(wag.)**	**904**	**0.000**
ν_{76}	γ(--CH) **(wag.)**	**904**	**0.000**
ν_{77}	γ(C=C) + γ(=CH) + γ(--CH)	**865**	**0.000**
ν_{78}	γ(C=C) + γ(=CH) + γ(--CH)	**865**	**0.000**
ν_{79}	γ(=CH) **(wag.)**	**811**	**0.000**
ν_{80}	γ(=CH) **(wag.)**	**811**	**0.000**
ν_{81}	γ(C-C) **(puckering)** + γ(--CH)	**772**	**0.000**
ν_{82}	γ(C-C) **(puckering)** + γ(--CH)	**772**	**0.000**
ν_{83}	γ(CCC) **(puckering)** + γ(=CH) **(wag.)**	**768**	**0.000**
ν_{84}	γ(CCC) **(puckering)** + γ(=CH) **(wag.)**	**768**	**0.000**
ν_{85}	γ(CCC) **(puckering)** + γ(=CH) **(wag.)**	**683**	**0.000**
ν_{86}	γ(CCC) **(puckering)** + γ(=CH) **(wag.)**	**683**	**0.000**
ν_{87}	γring (γCCC) **(puckering)** + γCH **(wag.)**	**673**	**0.000**

ν_{151}	γ(=CH) **(wag.)**	**805**	**28.765**
ν_{152}	γ(--CH) **(twist.)**	**770**	**43.417**
ν_{153}	γ(--CH) **(twist.)**	**770**	**43.417**
ν_{154}	γCH + γring (γCCC)	**761**	**2.302**
ν_{155}	γCH + γring (γCCC)	**761**	**2.302**
ν_{156}	γCH + γring (γCCC)	**682**	**3.046**
ν_{157}	γCH + γring (γCCC)	**682**	**3.046**
ν_{158}	γ(=CH) **(wag.)**	**632**	**15.012**
ν_{159}	γ(=CH) **(wag.)**	**632**	**15.012**
ν_{160}	γ(=CH) **(twist.)**	**573**	**6.938**
ν_{161}	γ(=CH) **(twist.)**	**573**	**6.938**
ν_{162}	γCH + γring (γCCC)	**551**	**18.747**
ν_{163}	γCH + γring (γCCC)	**551**	**18.747**
ν_{164}	γCC + γCH	**455**	**14.790**
ν_{165}	γCC + γCH	**455**	**14.790**
ν_{166}	γCC + γCH	**447**	**17.019**
ν_{167}	γCC + γCH	**447**	**17.019**
ν_{168}	γring (γCCC) **(puckering)**	**362**	**5.340**
ν_{169}	γring (γCCC) **(puckering)**	**362**	**5.340**
ν_{170}	γring (γC--C--C) **(puckering)**	**333**	**0.001**
ν_{171}	γring (γC--C--C) **(puckering)**	**333**	**0.001**
ν_{172}	γring (γCCC) **(puckering)** + γCH **(wag.)**	**241**	**3.018**
ν_{173}	γring (γCCC) **(puckering)** + γCH **(wag.)**	**241**	**3.018**
ν_{174}	γring (γCCC) **(puckering)** + γ(=CH) **(wag.)**	**202**	**3.585**
ν_{175}	γring (γCCC) **(puckering)** + γ(=CH) **(wag.)**	**202**	**3.585**
ν_{176}	γring (γCCC)	**64**	**3.787**
ν_{170}	γring (γCCC)	**64**	**3.787**
A_2g			
ν_{177}	(--CH) **str.**	**3040**	**0.000**
ν_{178}	(=CH) **str.**	**3031**	**0.000**
ν_{179}	ring (C--C) **str.** + ring (C-C) **str.**	**1544**	**0.000**
ν_{180}	(CCC) **str.** + δCH	**1476**	**0.000**
ν_{181}	ring (C--C) **str.** + δ(=CH) **(rock.)**	**1406**	**0.000**
ν_{182}	ring (C--C) **str.**	**1342**	**0.000**
ν_{183}	δCH **(clock & anticlockwise)**	**1248**	**0.000**
ν_{184}	δ (--CH) **(clock & anticlockwise)**	**1077**	**0.000**
ν_{185}	γ(=CH) **(twist.)**	**996**	**0.000**
ν_{186}	γ(--CH) **(twist.)**	**894**	**0.000**
ν_{187}	γ(--CH) + δ(C=C-C)	**858**	**0.000**
ν_{188}	γring (γCCC))	**764**	**0.000**

ν_{113}	(=CH) **str.**	**3032**	**1.707**
ν_{114}	(=CH) **str.**	**3032**	**1.707**
ν_{115}	ring (C=C) **str.**	**1638**	**3.772**
ν_{116}	ring (C=C) **str.**	**1638**	**3.772**
ν_{117}	ring (C--C) **str.**	**1614**	**9.122**
ν_{118}	ring (C--C) **str.**	**1614**	**9.122**
ν_{119}	ring (C--C-C) **str.** + δ(--CH)	**1537**	**40.909**
ν_{120}	ring (C--C-C) **str.** + δ(--CH)	**1537**	**40.909**
ν_{121}	ring (CCC) **str.** + δ(=CH) **(rock.)**	**1494**	**0.779**
ν_{122}	ring (CCC) **str.** + δ(=CH) **(rock.)**	**1494**	**0.779**
ν_{123}	ring (CCC) **str.** + δ(--CH)	**1453**	**2.096**
ν_{124}	ring (CCC) **str.** + δ(--CH)	**1453**	**2.096**
ν_{125}	ring (C--C--C) **str.** + δ(=CH) **(rock.)**	**1393**	**0.481**
ν_{126}	ring (C--C--C) **str.** + δ(=CH) **(rock.)**	**1393**	**0.481**
ν_{127}	ring (C--C--C) **str.** + δ(=CH) **(rock.)**	**1352**	**2.264**
ν_{128}	ring (C--C--C) **str.** + δ(=CH) **(rock.)**	**1352**	**2.264**
ν_{129}	δ(--CH) + δ(=CH) **(rock.)**	**1317**	**0.358**
ν_{130}	δ(--CH) + δ(=CH) **(rock.)**	**1317**	**0.358**
ν_{131}	δ(--CH) + δ(=CH) **(rock.)**	**1290**	**0.404**
ν_{132}	δ(--CH) + δ(=CH) **(rock.)**	**1290**	**0.404**
ν_{134}	δ(=CH) **(rock.)**	**1250**	**3.875**
ν_{135}	δ(=CH) **(rock.)**	**1250**	**3.875**
ν_{136}	δ(=CH) **(rock.)** + δ(--CH)	**1214**	**3.795**
ν_{137}	δ(=CH) **(rock.)** + δ(--CH)	**1214**	**3.795**
ν_{138}	δ(=CH) **(sciss.)** + δ(--CH)	**1145**	**3.545**
ν_{139}	δ(=CH) **(sciss.)** + δ(--CH)	**1145**	**3.545**
ν_{140}	δCH + δ(CCC)	**1117**	**10.510**
ν_{141}	δCH + δ(CCC)	**1117**	**10.510**
ν_{142}	γ(=CH) **(twist.)**	**996**	**22.252**
ν_{143}	γ(=CH) **(twist.)**	**996**	**22.252**
ν_{144}	γ(--CH) **(wag.)**	**928**	**195.524**
ν_{145}	γ(--CH) **(wag.)**	**928**	**195.524**
ν_{146}	γ (--CH) **(twist.)**	**898**	**2.325**
ν_{147}	γ(--CH) **(twist.)**	**898**	**2.325**
ν_{148}	γC=C + γ(--CH) **(wag.)**	**861**	**0.478**
ν_{149}	γC=C + γ(--CH) **(wag.)**	**861**	**0.478**
ν_{150}	γ(=CH) **(wag.)**	**805**	**28.765**

(جدول-3): مقارنة ترددات الاهتزاز (cm^{-1}) لجزيئة [6] سايكلاسين نوع Chiral مع ترددات الاهتزاز المناظرة لها في جزيئة الفينانثرين .

Molecule	C-H sym.	C-H asym.	C---Ca sym.	C---Ca asym.	C---Cc sym.	C---Cc asym.	δCH sym.	δCH asym	γCH sym.	γCH asym.
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
[6] Cyclacene Chairal (D_{3d}) 	3057 A_{1g}	3042 A_{1u}	1602 A_{1g}	1642 A_{1u}	1637 A_{1g}	1641 E_g	1224 A_{1g}	1244 A_{1u}	933 A_{1g}	915 E_g



Atom	Electronic Charge	
	(0.171) - (- 0.171)	
C	-0.147 (C--C), -0.166(C=C)	
H	0.156 (=CH), 0.171(---CH)	
C	-0.025	
C	-0.012	

(شكل-6): توزيع الشحنة الالكترونية على ذرات جزيئة [6] سايكلاسين نوع Chiral، و تبعا للشكل التماثلي لها (D_{3d}).

	(puckering)		
ν_{189}	δ(C=CC) **(clock & anticlockwise)**	**673**	**0.000**
ν_{190}	γ(C=CC)+ γ(--CH) **(twist.)**	**586**	**0.000**
ν_{191}	γring (γCCC) **(puckering)**	**404**	**0.000**
ν_{192}	δring (δCCC)) **(elongation)**	**351**	**0.000**
ν_{193}	γring (γCCC)) **(puckering)**	**138**	**0.000**
A_{2u}			
ν_{194}	CH **str.**	**3055**	**238.908**
ν_{195}	CH **str.**	**3051**	**1.645**
ν_{196}	ring (C=C) **str.**	**1641**	**0.890**
ν_{197}	δ(--CH)	**1474**	**2.845**
ν_{198}	ring (CCC **str.**)	**1409**	**1.776**
ν_{199}	δ(=CH) **(sciss.)** + ring (C--C--C) **str.**	**1346**	**37.368**
ν_{200}	δring (δC--C-C) + δCH	**1221**	**11.095**
ν_{201}	δ(--CH) + δ(=CH) **(sciss.)**	**1193**	**2.947**
ν_{202}	δ(=CH) **(sciss.)**	**1161**	**1.485**
ν_{203}	γ (--CH) **(wag.)**	**917**	**8.764**
ν_{204}	γ (=CH) **(wag.)**	**812**	**0.536**
ν_{205}	δring (δCCC) **(elongation)**	**772**	**0.160**
ν_{206}	γring (γCCC) + γ(=CH)	**709**	**0.206**
ν_{207}	γring (γCCC)**(puckering)**	**629**	**5.532**
ν_{208}	γring (γCCC)**(puckering)**	**330**	**0.617**
ν_{209}	γring (γCCC)) **(puckering)**	**201**	**0.003**
ν_{210}	γring (γCCC)) **(puckering)**	**108**	**0.114**

Scaling factors: 0.96 (CH str.) for all DFT (B3LYP/6-311G) frequencies, [26].

γ: Out of plane of the molecule.

δ: In- plane of the molecule. ,

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

P- ISSN 1991-8941 , E-ISSN 2706-6703 (*JUAPS*) مجلة جامعة الانبار للعلوم الصرفة Open Access
2011 ,(5), (2) :49-63

CALCULATED VIBRATION FREQUENCIES AND IR ABSORPTION INTENSITIES OF [6] CYCLACENE (CHIRAL) MOLECULE

REHAB M. KUBBA

E.mail: scianb@yahoo.com

ABSTRACT.:

Density Functional Theory (DFT) of the type (B3LYP) and a Gaussian basis (6-311G) was applied for calculating the vibration frequencies and IR absorption intensities for normal coordinates of the ([6] Cyclacene (Chiral), with (D3d) symmetry) molecule. Comparison of the results showed that for the C-H stretching vibrations the sym. modes show higher frequency values than the asym. And the inverse for C-C stretching vibrations.

As for the δCH and δCC deformation the asym. vibrations where of lower frequency values than the sym.;

νsym.CH str. > νasym. CH str.

νsym CC str. < νasym. CC str.

ν C=C str. (circum.) > ν C--C str. (axial.) > ν C-C str. (circum.)

And,νsym. δCH > νasym. δCH

νsym. γCH < νasym. γCH

δCH (rocking) > δCH (scissoring)

γCH (twisting) > γCH (wagging)

Where axial are the vertical C-C bonds (annular bonds) in the rings and circumferential are the outer ring bonds.

The results include the assignment of all puckering, breathing and clock-anticlockwise bending vibrations. Also calculations and studying the distribution of electronic density on the atoms of the molecule. They allow a comparative view of the charge density at the carbon atoms too.