

## دراسة ترددات الاهتزاز لجزيئة الكورانيولين وجذورها الأيونية الموجبة والسالبة باستخدام حسابات ميكانيك الكم

رحاب ماجد كبة  
منال عبيد الدليمي  
مثنى شنشل  
جامعة بغداد- كلية العلوم

تاريخ الاستلام: ٢٠١٠/١٠/١٧ تاريخ القبول: ٢٠١١/٦/١٣

### الخلاصة

تم حساب ترددات الاهتزاز وشدة امتصاص الأشعة تحت الحمراء والإحداثيات المتعامدة لجذري أيون الكورونين الموجب الشحنة والسالب الشحنة، باستخدام حسابات ميكانيك الكم شبه التجريبية ممثلة بنموذجي الحساب MINDO/3 و PM3 باستخدام طرق الحساب الأساسية ممثلة بنظرية دوال الكثافة (DFT) وباسلوب (B3LYP) وعناصر قاعدة (6-311G). و قد مكنت الحسابات من التعريف الصحيح لجميع ترددات الاهتزاز المقاسة تجريبيا للأيون الموجب لهذه الجزيئة، و بالصيغتين التماثلية و التكافؤية. كما أمكن التنبؤ بجميع ترددات الاهتزاز للأيون السالب للجزيئة نفسها. و بناء على هذه التعريفات فقد أمكن إجراء المقارنة بين ترددات الاهتزاز للأيونين والجزيئة المتعادلة.

كلمات مفتاحيه : ترددات الاهتزاز ، الكورانيولين ، حسابات ميكانيك الكم

### المقدمة

shaped كنتيجة لهذا التوتر شكل(2)، حيث اظهرت دراسة الشكل البلوري للجزيئة بواسطة حيود الاشعة السينية x-ray diffraction التي قام بها Hanson & Nordman عام (1976) [4] ، انحراف زوايا التأخر عن قيمها الطبيعية. تم تحضير Dibenzo fluoranthene المعروف بالكورانيولين Corannulene لأول مرة على يد [2,1] Barth & Lawton، وقاما بقياس طيف الاشعة تحت الحمراء للجزيئة تجريبيا. وبعد اكتشاف الفلرين Fullerene (C60) المعروف بالكرات الضخمة Bulkyballs عام (1985) توجه اهتمام الكيميائيين مرة اخرى الى الهيدروكربونات العطرية متعددة النويات منحنية السطح Curved Surface polynuclear aromatic hydrocarbons المعروفة بالصحن الضخمة Bulkybowls لاهميتها كاجزاء تركيبية مهمة ( Polar end cap لتصنيع الفلرين التي يمثل الكورانيولين ابسط مثال لها ، فتمت محاولة اعادة تحضيره بكميات كبيرة نسبيا وبزمن قصير من قبل Scoot et al. عام (1991)[5] و Sygula et al. عام (1992)[6, 7]. اجريت العديد من

اشتق اسم الكورانيولين من كلمة لاتينية مكونة من مقطعين (Cor) وتعني القلب او اللب و annula وتعني الحلقة) وقد جاءت هذه التسمية لتضمن علاقة جزيئة الكورانيولين بمنشأها (جزيئة الكورونين)، تتميز الجزيئة بتركيب الكتروني فريد اذ تمتلك صيغة رنينية فريدة resonance form فالحلقة الخماسية الداخلية An inner cyclopentadienyl anion ذي شحنة سالبة بينما تكون حلقات البنزين الخارجية An outer cyclopentadecaheptaenyl cation ذات شحنة موجبة [2,1] وتطبق قاعدة هكل (4n+2) لكل صيغة منهما على انفراد. وقد اثبتت حسابات SCF-MO التي اجراها Gleicher عام (1967)[3] ان هذه الصيغة المستقطبة تتفق مع توزيع الكورونات  $\pi$  للنظام شكل (1). تتميز الجزيئة أيضا بنظام متوتر strain system ناتج عن شد اجزائه وانحاء كل حلقة من حلقات البنزين الخارجية لتتخذ بذلك شكلا شبيها بالصحن Bowl or Dash

الحسابات النظرية لجزيئة الكورانيولين [8] باستخدام طرائق ميكانيك الكم شبه التجريبية (MNDO, PM3, AM1) والاساسية ab initio وقد اقتصر تلك الحسابات على حساب حرارة التكوين للجزيئة Heat of formation من قبل Chickos et al. عام (2002) [9]. وحساب طاقة الانحناء Curvature energy والطاقة الكلية وطاقة الانقلاب Bowl-to-bowl inversion barriers من قبل Dinadayalane et al. و Narhari et al. عامي 2001 و [11,10] 2002 .

## النتائج والمناقشة:

نظرا لافتقار ادبيات الكيمياء للتشخيص الطيفي المتكامل للجزيئة فقد تم اعتماد برنامج كاوس [12](Gaussian 3)، لاستخدام اسلوب الحساب التام (B3LYP/6-) (DFT) 311G بصورة رئيسة واسلوبي الحساب شبه التجريبي MINDO/3 و PM3 لغرض المقارنة لحساب ترددات الاهتزاز وشدة امتصاص الاشعة تحت الحمراء عند الشكل الهندسي التوازني للجزيئة.

كما تم تصنيف الترددات الاهتزازية المحسوبة تكافؤيا وتمائليا بالاستعانة ببرنامج الرسم DRAW.MOL [13] العائد لبرنامج MINDO/3-FORCES .

و يبين الشكل (3) نموذجا من انماط الحركة الاهتزازية التي تم تصنيفها من خلال هذا البرنامج. كذلك اجريت عملية مقايسة لتحسين القيم العددية للترددات المحسوبة على وفق MINDO/3-FORCES والتي جاءت قريبة من القيم المقاسة تجريبيا من قبل بارث ولاوتن.

وقد تم استخدام طريقة IUPAC شكل (4a) والطريقة النظامية شكل (4b) في ترقيم الذرات، وقورنت النتائج مع القيم المقاسة تجريبيا من قبل هانسون ونوردمان [4] Hanson & Nordman ومع المحسوبة نظريا من قبل Kao & Allinger عام (1976)[14].

تنتمي جزيئة الكورانيولين إلى المجموعة التماثلية C5v وفقا لجدول القيم الذاتية (Character table) [13] وتبعا لذلك تم استخراج العدد الكلي للأصناف التماثلية (tot.) كما يأتي:

$$\text{tot.} = 3N = 3 \times 30 = 90 = 10 A1 + 8 A2 + 18 E1 + 18 E2$$

وبعد طرح درجات الحرية الانتقالية الثلاث  $E1(x, y)$ , و درجات الحرية الدورانية الثلاث  $E1(Rx, Ry)$ ,  $A1(z)$

$$A2(Rz)] \text{ يصبح عدد تماثلات الحركة الاهتزازية vib كالاتي:}$$

$$\text{vib.} = 3N - 6 = (3 \times 30) - 6 = 84 = 9A1 + 7A2 + 16E1 + 18E2$$

وعند الاطلاع على جدول القيم الذاتية يلاحظ امتلاك الجزيئة 36 نمطا (18E2) فعالا في طيف رامان، 41 نمطا (16E1, 9A1) فعالا في طيف رامان و طيف الاشعة تحت الحمراء معا، و 7 انماط (7A2) غير فعالة في طيف رامان او طيف الاشعة تحت الحمراء.

## تصنيف ترددات الاهتزاز لجزيئة الكورانيولين المتعادلة

وتشتمل ترددات الاهتزاز لجزيئة الكورانيولين على اربعة وثمانين نمطا اهتزازيا تم تصنيفها كالاتي:

أ- ترددات الانماط الاهتزازية الواقعة في مستوى سطح الجزيئة وتتضمن:

$$1- \text{ترددات مط الاصرة CH}$$

وعددها 10 ترددات بقدر عدد اواصر CH وتتراوح قيم تردداتها بين (3051-3028) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.00-121.379) كم مول-1. وبالاطلاع على جدول (2) والاشكال الواصفة للانماط الاهتزازية يمكن ملاحظة ان:

$$> \text{vsym (CH str.) (3046 cm-1)}$$

$$\text{vasym (CH str.) (3026 cm-1)}$$

$$2- \text{ترددات المط الحلقية.}$$

## The CC stretching vibrations

وتشتمل على 19 ترددا (NC-1) حيث NC عدد ذرات الكاربون في الجزيئة. وتتراوح القيم العددية لتردداتها بين (1659-1444) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.00-2.453) كم مول-1، جدول (2) كما يمكن ملاحظة العلاقة الآتية:

$$> \text{vsym (CC str.) (1659 cm-1)}$$

$$\text{vasym (CC str.) (1654 cm-1)}$$

3- ترددات انحناء الاصرة CH عند مستوى سطح الجزيئة (CH). وعددها 10 ترددات بقدر عدد اواصر CH. تتراوح القيم العددية لتردداتها بين (1486-1171) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.00-4.353) كم مول-1، جدول (2). كما يمكن ملاحظة العلاقة الآتية:

$$> \text{vasym (H) (1486 cm-1)}$$

vsym ( CH) (1276 cm-1)

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

وعدها 18 ترددا تتراوح قيمها بين (1202-448) سم-1 وشدة امتصاصها بين (3.380-0.00) كم مول-1. وعند الاطلاع على جدول (2) يلاحظ ان:

vasym ( CCC)(872 cm-1) >

vsym ( CCC)(603 cm-1)

ب- ترددات الانماط الاهتزازية الواقعة خارج مستوى سطح الجزيئة.

Out of plane modes of vibrations

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

وعدها 10 ترددات بقدر عدد اواصر CH. تتراوح قيمها بين (992-771) سم-1 وشدة امتصاصها بين (-153.339-0.00) كم مول-1. ويلاحظ فيها العلاقة الآتية:

vasym (γ CH) (992 cm-1) >

vsym (γ CH) (876 cm-1)

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

وعدها 17 ترددا (NC-3) تتراوح قيمها بين (143-679) سم-1 وشدة امتصاصها بين (22.803-0.00) كم مول-1.

vsym (γCC) (563 cm-1) >

vasym (γCC) (316 cm-1)

ويبين (شكل-5) الإشكال البيانية الواصفة لبعض أنماط الحركة الاهتزازية لجزيئة الكورانيولين المتعادلة.

ترددات الاهتزاز لجذر الكورانيولين الموجب +.(C20H10).

اقتصرت الدراسات الطيفية لجذر الكورانيولين الموجب التي وردت في الادبيات على طيف الامتصاص المرئي Visible spectrum للجزيئة الذي قاسه بارث ولاوتن والباحثين معهم عام (1967) [18].

و لم يتم العثور خلال مراجعة الادبيات على اي دراسة تجريبية او نظرية لحساب ترددات الاهتزاز او شدة امتصاص الاشعة تحت الحمراء او القيم الهندسية للجزيئة.

ونظرا لأهمية ترددات الاهتزاز وشدة الامتصاص للأيونات الموجبة لافتراض عائدة الحزم المنبعثة من الفضاء اليها

[19]، فقد تم حسابها عند الشكل الهندسي التوازني للجزيئة وفق نظرية دوال الكثافة وباسلوب (B3LYP) وعناصر قاعدة كاوس (6-311G) (شكل-6) جدول (3).

ينتمي جذر الكورانيولين الموجب الى المجموعة التماثلية CS و يمتلك اربعة وثمانون ترددا اساسيا (84 = 3N-6) تتوزع احداثياتها المتعامدة استنادا الى نظرية المجموعة الى (57) نمطا اهتزازيا تقع ضمن مستوى سطح الجزيئة و (27) نمطا اهتزازيا تقع خارج مستوى سطح الجزيئة وجميع هذه الانماط فعالة في طيف رامان و طيف الاشعة تحت الحمراء. اما العدد الكلي للأصناف التماثلية tot. وعدد تماثلات الحركة الاهتزازية vib فقد تم استخراجها كما يأتي: tot. = 3N = 90 tot. = 30 × 3 = 90

vib = 3N-6 = (3 × 30) - 6 = 84 = 43 A' + 41 A"

op = N-3 = 27 , ip = 2N-3 = 57

ip : يشير الى الانماط الاهتزازية الواقعة ضمن مستوى سطح الجزيئة.

op : يشير الى الانماط الاهتزازية الواقعة خارج مستوى سطح الجزيئة. A': يشير الى الانماط المتماثلة نسبة لسطح تماثل الجزيئة σ الذي يخترق الجزيئة من الوسط.

A" : يشير الى الانماط غير المتماثلة نسبة لسطح تماثل الجزيئة σ. وقد تم تصنيف الانماط الاهتزازية العائدة للجزيئة تماثليا وتكافؤيا بالاستعانة بأشكال الحركة الاهتزازية لبرنامج كاوس.

تصنيف ترددات الاهتزاز لجذر الكورانيولين الموجب +.(C20H10).

أ- ترددات الانماط الاهتزازية الواقعة عند مستوى سطح الجزيئة.

وتشتمل على (57A') نمطا اهتزازيا فعالا في طيف رامان وطيف الاشعة تحت الحمراء تم تصنيفها كما يأتي:

1- ترددات مط الاصرة CH وتتراوح قيم تردداتها بين (3076-3056) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.0140-21.190) كم مول-1 جدول (4)

2- ترددات المط الحلقية. وتتراوح قيم تردداتها بين (1652-1572) سم-1 وشدة امتصاصها بين (1.708-200.647) كم مول-1.

3- ترددات انحناء الأصرة CH عند مستوى سطح الجزيئة CH . وتتراوح قيم تردداتها بين (1102-1536) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.034-502) كم مول-1.

4- ترددات انحناء الحلقات العطرية عند مستوى سطح الجزيئة (CCC) . وتتراوح قيمها بين (22-1113) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.076-380) كم مول-1.

ب- ترددات الانماط الاهتزازية الواقعة خارج مستوى سطح الجزيئة.

وتشتمل على (57A') نمطا اهتزازيا فعلا في طيف رامان و طيف الاشعة تحت الحمراء تم تصنيفها كما يأتي:

1- ترددات انحناء الأصرة CH خارج مستوى سطح الجزيئة (γCH) . وتتراوح قيمها بين (276-1022) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.844-148.596) كم مول-1.

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

وتتراوح قيمها بين (135-747) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.079-31.755) كم مول-1.

ترددات الاهتزاز لجذر الكورانيولين السالب (C20H10)

كما في حالة الجذر الموجب لجزيئة الكورانيولين فقد اقتصرت الدراسات الطيفية لجذر الكورانيولين السالب التي وردت في الادبيات على طيف الامتصاص المرئي Visible spectrum للجزيئة الذي قاسه بارث ولوتن عام (1967) . [15]

لذا فقد تم استخدام اسلوب MINDO/3-FORCES لحساب ترددات الاهتزاز وشدة امتصاص الاشعة تحت الحمراء للجزيئة، وصنفت الانماط الاهتزازية العائدة للجزيئة تماثلها وتكافؤيا بالاستعانة ببرنامج الرسم DRAW . MOL . وكما مبين في الشكل (8) الذي يمثل انموذجا من انماط الحركة الاهتزازية للجزيئة.

ينتمي جذر الكورانيولين السالب الى المجموعة التماثلية CS حيث انها تمتلك (σ, E) من عمليات التماثل ولها 84 ترددا اساسيا حسب العلاقة (3N-6) وعدد الاصناف التماثلية (tot.) والتماثلات غير القابلة للاختزال irreducible representation هي:

$$\text{tot.} = 3N = 84$$

$$\text{vib} = 43 A' + 41 A''$$

$$\text{ip} = N - 3 = 57, \quad \text{op} = N - 3 = 27$$

كذلك تم حساب حرارة التكوين وقيم الاحداثيات الهندسية الداخلية (اطوال وزوايا التآصر) للجزيئة، ونظرا لعدم توفر قيم تجريبية او نظرية فقد تم استخدام برنامج PM3 لغرض المقارنة جدول (3).

تصنيف ترددات الاهتزاز لجذر الكورانيولين السالب (C20H10)

أ- ترددات الانماط الاهتزازية الواقعة عند مستوى سطح الجزيئة.

1-ترددات مط الاصرة CH. وتتراوح قيم تردداتها بين (2987-3047) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.012-219.432) كم مول-1 جدول (4)

2- ترددات المط الحلقية. و تتراوح قيم تردداتها بين (1601-1675) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.962-65.334) كم مول-1.

3- ترددات انحناء الأصرة CH عند مستوى سطح الجزيئة (CH) . و تتراوح قيم تردداتها بين (1038-1536) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.686-127.408) كم مول-1.

4- ترددات انحناء الحلقات العطرية عند مستوى سطح الجزيئة (CCC) . وتتراوح قيمها بين (125-1120) سم-1 وشدة امتصاصها بين (0.0740-64.818) كم مول-1.

ب- ترددات الأنماط الاهتزازية الواقعة خارج مستوى سطح الجزيئة.

1- ترددات انحناء الأصرة CH خارج مستوى سطح الجزيئة (γCH) . وتتراوح قيمها بين (763-964) سم-1 وتمتلك شدة امتصاص بين (0.403-133.847) كم مول-1.

2- ترددات انحناء الحلقات العطرية خارج مستوى سطح الجزيئة (γCCC) . وتتراوح قيمها بين (94-720) سم-1 وتمتلك شدة امتصاص بين (0.039-19.462) كم مول-1.

Comparisons علاقات المقارنة

1- ترددات مط الاصرة

(The CH stretching vibrations)

تتعاقب ترددات مط الاصرة CH المتماثلة العائدة للاصناف الثلاثة (متعادل وموجب وسالب) لجزيئة الكورانيولين حسب العلاقات الآتية:

5- ترددات انحناء الأصرة CH خارج مستوى سطح الجزيئة.

( $\gamma$ CH)

$$\gamma\text{CH (C20H10)}^+ > \gamma\text{CH (C20H10)}^- > \gamma\text{CH (C20H10)}$$

6- ترددات انحناء الحلقات العطرية خارج مستوى سطح

الجزيئة ( $\gamma$ CC).

$$\gamma\text{CC (C20H10)}^+ > \gamma\text{CC (C20H10)}^- > \gamma\text{CC (C20H10)}$$

الاستنتاجات: Conclusions 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  $C_{2v}$  في الجزيئة المتعادلة الى  $C_s$  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).

$$vsym\ CH\beta\ str.\ (C_{20}H_{10})^+ > vsym\ CH\beta\ str.\ (C_{20}H_{10})^-$$

$$vsym\ CH\alpha\ str.\ (C_{20}H_{10})^+ > vsym\ CH\alpha\ str.\ (C_{20}H_{10})^- > vsym\ CH\alpha\ str.\ (C_{20}H_{10})$$

2- ترددات المط الحلقية

The CC stretching vibrations

تكون ترددات المط الحلقية المتماثلة لأواصر CC لجزيئة الكورانيولين اكبر من نظيرتها للجذر الموجب الذي تكون تردداته اكبر منه للجذر السالب اي ان:

$$vsym\ CC\ str.\ (C_{20}H_{10})^- >$$

$$vsym\ CC\ str.\ (C_{20}H_{10})^+ >$$

$$vsym\ CC\ str.\ (C_{20}H_{10})$$

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

و تتبع ترددات الانحناء المتماثلة للأصرة CH عند مستوى سطح الجزيئة ولاصناف جزيئة الكورانيولين الثلاثة التسلسل الآتي :

$$sym\ CH\ (C_{20}H_{10})^- >$$

$$sym\ CH\ (C_{20}H_{10}) >$$

$$sym\ CH\ (C_{20}H_{10})^+$$

وتتطبق العلاقة نفسها لترددات الانحناء غير المتماثلة.

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

$$sym\ CCC\ (C_{20}H_{10})^- >$$

$$sym\ CCC\ (C_{20}H_{10})^+ >$$

$$sym\ CCC\ (C_{20}H_{10})$$

و تعود اعلى شدة امتصاص للتردد العائد لجزيئة الكورانيولين المتعادل.

$$asym\ CCC\ (C_{20}H_{12})^- >$$

$$asym\ CCC\ (C_{20}H_{12})^+ >$$

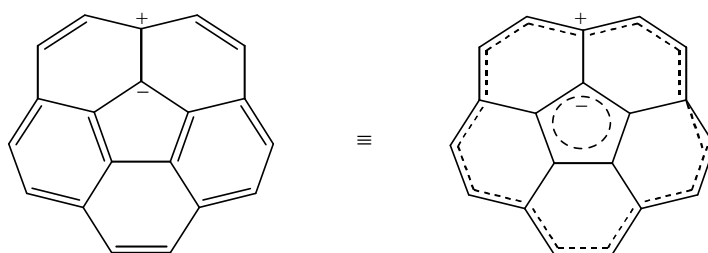
$$asym\ CCC\ (C_{20}H_{12})$$

## References

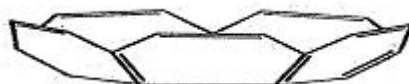
- 1- Barth E. and Lawton G., (1966). Synthesis of corannulene *J. Am. Chem. Soc.* ;88 (2). **380-381.**
- 2- Barth E. and Lawton G., (1971). Synthesis of corannulene. *J. Am. Chem. Soc.* ;93 (7):**1730-1745.**
- 3- Gleicher G.H., (1967). Calculation on the corannulene system. *Tetrahydron* ; **23: 4257.**
- 4- Hanson J.C. and C.E. Nordman, (1976). The crystal and molecular structure of corannulene, C<sub>20</sub>H<sub>10</sub>. *Acta Crystallog. Sect.*; **B32:1147-1153.**
- 5- (a) Scott L.T., Hashemi M.M., Meyer D.T. and Warren H.B., (1991). Corannulene. A convenient new synthesis. *J. Am. Chem. Soc.* ; **113 (18): 7082-7084.**  
 (b) Scott L.T., Hashemi M.M. and Bratcher M.S., (1992). Corannulene bowl-to-bowl inversion is rapid at room temperature. *J. Am. Chem. Soc.* ; **114(5): 1920-1921.**  
 (c) Scott L.T., Cheng P.C., Hashemi M.M. and Bratcher M.S., Meyer D.T., and Warren H.B., (1997). Corannulene. A Three-Step Synthesis. *J. Am. Chem. Soc.* ; **119 (45): 10963-10968.**
- 6- Sygula A., and Rabideau P.W., (1999). Non-Pyrolytic Syntheses of Buckybowls: Corannulene, Cyclopentacorannulene, and a Semibuckminsterfullerene ; **121 (34): 7800-7803.**
- 7- Sygula A. and Rabideau P.W. (2000). A Simple, Large Scale Synthesis of the Corannulene System. *J. Am. Chem. Soc.*; **122: 6323.**
- 8- Biedermann P.U., Pogodin S. and Agranat I., (1999). *J. Org. Chem.*; **64: 3655.**
- 9- Chickos S., Webb P., Nichols G., Kiyabayshi T., Pei-Chaoand, Scott, L. (2002). The enthalpy of vaporization and sublimation of corannulene, coronene, and perylene at T= 298.15 K., *J. Chem. Thermodynamics*, ; **34: 1195-1206.**
- 10- a)-Narhari Sastry G. and Deva Priyakumar U., (2001). The role of heteroatom substitution in the rigidity and curvature of buckybowls. A Theoretical study., *J. Chem. Soc. Perkin Trans.* ; **2: 30-40.**
- 11- Dinadayalane T.C. and Narhari Sastry G., (2002). *J. Mol. Structure, Theochem.*, **579: 63-72.**
- 12- Frish M.J., (2003). Gaussian 03, Revision B.03, Gaussian Pittsburgh, PA.
- 13- Al-Maamury A.M. and Shanshal M., (1990). *Chim. Acta Turc.*; **18: 99.**
- 14- J. Kao and L. Allinger, (1977). *J. Am. Chem. Soc.* **99; No.4: 975.**
- 15- G. Davidson, (1990). "Introduction in Group Theory For Chemists", *Applied Science Publishers Ltd. London*, Elsevier Publishing Comp. Ltd.
- 16- a)- Kubba, R.M., Al-Ani R.L. and Shanshal, M. (2005). Carbon  $\sigma$ -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 Derivatives, *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; A Density 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.**
- 17- Lewars E., (2004). COMPUTATIONAL CHEMISTRY "Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics", Chemistry Department, Trent University, Peterborough, Ontario, Canada.
- 18- Janata J., Gendell J., Chi-Yuan Ling, Barth E., Backes L., Mark H. B., and R. J. Lawton G., (1967). Concerning the anion and cation radicals of corannulene. *J. Am. Chem. Soc.*; **89(12); 3056-3058.**
- 19- a)- Joblin C., Boissel P., Legar A., D'Hendcourt L. and Defourneau D., (1994). Infrared spectroscopy of gas-phase PAH molecules. *Astronomy and Astrophys.*; **281:**

923-936. :b)- Hudgins M. and Allamandola L., (1995). Infrared Spectroscopy of Matrix Isolated Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, Cations.2. The Members of the Thermodynamically Available Series Through

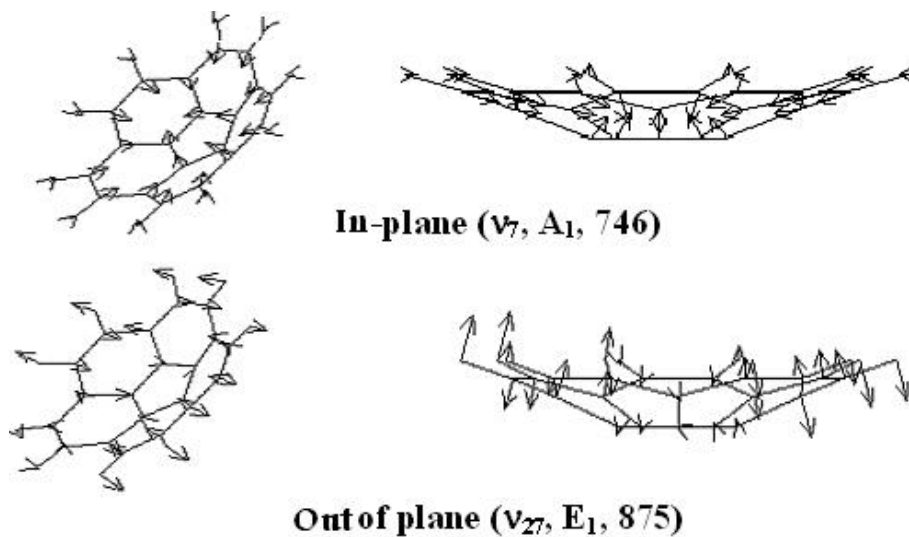
Corannulene. *J. Phys.Chem.*; 99: 3033-3046., :c)- Camerman A. and Trotter. (1964). *J. Proc. R. Soc. London, Ser. ; A279: 129.*



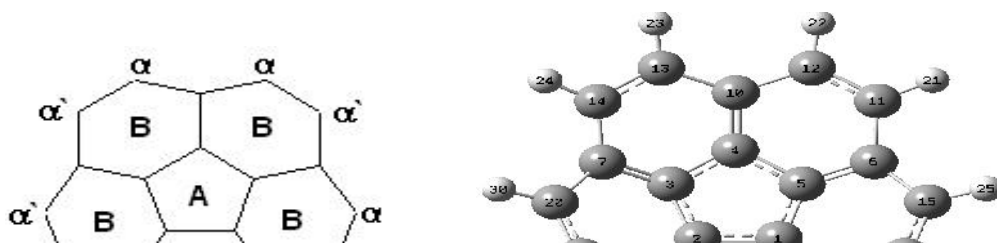
شكل (1) الصيغة الرنينية لجزيئة الكورانوليون.



شكل (2)



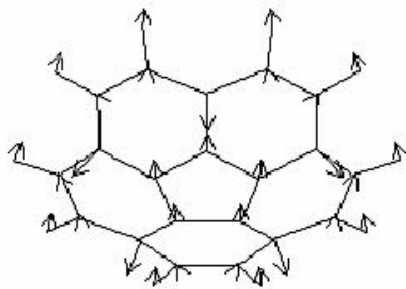
شكل (3) انموذج من انماط الحركة الاهتزازية لجزيئة الكورانوليون المتعادلة



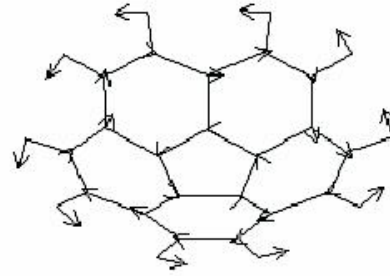
(b)

(a)

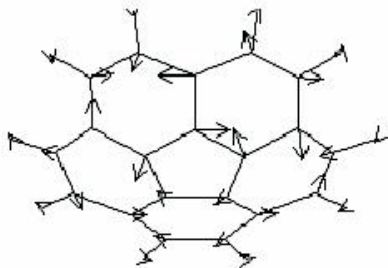
شكل (4): ترميز الذرات حسب (a) برنامج كاوس و (b) الطريقة النظامية، في جزيئة الكورانيولين المتعادلة على وفق الشكل الهندسي التماثلي المحسوب لها (C<sub>5v</sub>).



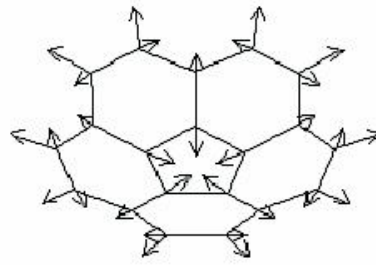
v<sub>8</sub>, A<sub>1</sub>, 551



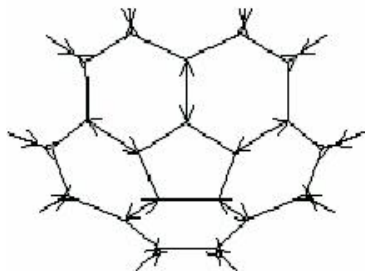
v<sub>12</sub>, A<sub>2</sub>, 1222



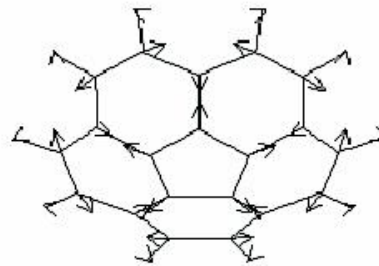
v<sub>37</sub>, E<sub>2</sub>, 1401



v<sub>3</sub>, A<sub>1</sub>, 1530

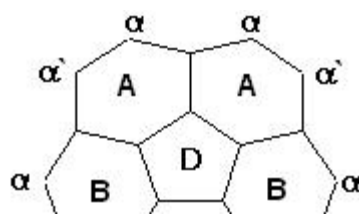
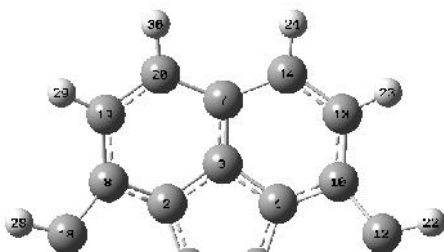


v<sub>1</sub>, A<sub>1</sub>, 3046



v<sub>19</sub>, E<sub>1</sub>, 1620

شكل (5): الإشكال البيانية الواصفة لبعض أنماط الحركة الاهتزازية لجزيئة الكورانيولين المتعادلة.

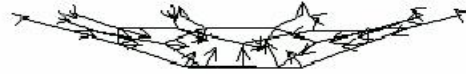
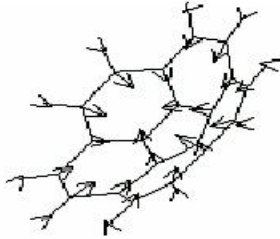




(a)

(b)

شكل (6): ترميز الذرات حسب (a) برنامج كاوس و (b) الطريقة النظامية، لجذري الكورانيولين الموجب والسالب على وفق الشكل الهندسي التماثلي المحسوب لهما ( $C_s$ ).



in-plane ( $v_{46}, A', 747$ )



out of plane ( $v_{60}, A'', 954$ )

شكل (7): أنموذجين من أنماط الحركة الاهتزازية، عند مستوى سطح الجزيئة و خارج مستوى سطح الجزيئة لجذر الكورانيولين الموجب.



In-plane ( $v_{50}, A', 647$ )



Out of plane ( $v_{66}, A'', 815$ )

شكل (8): أنموذج من أنماط الحركة الاهتزازية، عند مستوى سطح الجزيئة و خارج مستوى سطح الجزيئة لجذر الكورانولين السالب.

**Table (1): Calculated geometry for Corannulene molecule.**

Bond length (Å) & Bond angles (deg.)	This work			Other works	
	Mindo/ 3-Forces	PM3	DFT	Calc. [4]	Expt. [14]
C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	1.470	1.431	1.419	1.413	1.418
C <sub>4</sub> C <sub>10</sub>	1.417	1.378	1.385	1.402	1.392
C <sub>10</sub> C <sub>13</sub>	1.466	1.440	1.450	1.440	1.440
C <sub>13</sub> C <sub>14</sub>	1.386	1.376	1.391	1.391	1.397
H <sub>23</sub> C <sub>13</sub>	1.107	1.095	1.083	-----	-----
< C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	107.9	107.9	108.000	-----	-----
< C <sub>6</sub> C <sub>11</sub> C <sub>12</sub>	123.3	122.2	121.966	-----	-----
< C <sub>4</sub> C <sub>10</sub> C <sub>12</sub>	111.8	114.6	114.363	-----	-----
< H <sub>10</sub> C <sub>12</sub> C <sub>22</sub>	117.9	118.0	119.332	-----	-----
< H <sub>30</sub> C <sub>20</sub> C <sub>19</sub>	117.9	118.0	118.482	-----	-----
Dipole moment Debye	-----	2.43407	2.3279	-----	-----
Heat of formation (U <sub>H<sub>f</sub></sub> kcal)	178.441	139.416	153	-----	-----

**Table (2): Vibrational frequencies and IR absorption intensities for neutral Corannulene molecule.**

Symmetry & description		Frequency cm <sup>-1</sup>				Intensity (km/mol)
		Mindo/ 3-Forces Scaled	PM3	DFT B3LYP	Exptl. [2]	DFT B3LYP
A <sub>1</sub>						
€ <sub>1</sub>	CH str.	3046	3406	3051	3050	8.666
€ <sub>2</sub>	ring (C=C str.)	1634	1785	1659	-----	0.094
€ <sub>3</sub>	ring (CCC str.)	1530	1579	1467	-----	1.887
€ <sub>4</sub>	δCH (sciss.) + ring (δCCC)	1215	1348	1276	-----	1.427
€ <sub>5</sub>	δCH (sciss.) + ring (δCCC)	1029	1132	1054	-----	2.162
€ <sub>6</sub>	γCH	893	939	876	905	153.339
€ <sub>7</sub>	δring (δCCC) (breathing)	746	713	603	-----	4.380
€ <sub>8</sub>	γCC (rings B)	551	581	563	-----	22.803

€ <sub>9</sub>	γCC ( <b>ring A</b> )	143	148	146	-----	7.246
<b>E<sub>1</sub></b>						
€ <sub>10</sub>	CH str.	3043	3406	3049	-----	121.379
€ <sub>11</sub>	CH str.	3043	3406	3049	-----	121.379
€ <sub>12</sub>	CH str.	3027	3395	3028	-----	9.536
€ <sub>13</sub>	CH str.	3027	3395	3028	-----	9.536
€ <sub>14</sub>	ring (CC str.)	1620	1754	1654	-----	0.713
€ <sub>15</sub>	ring (CC str.)	1620	1754	1654	-----	0.713
€ <sub>16</sub>	δCH	1459	1564	1486	-----	4.353
€ <sub>17</sub>	δCH	1459	1564	1486	-----	4.353
€ <sub>18</sub>	ring (CC str.) + δCH	1397	1533	1444	-----	2.453
€ <sub>19</sub>	ring (CC str.) + δCH	1397	1533	1444	-----	2.453
€ <sub>20</sub>	ring (CCC str.)	1292	1416	1345	-----	10.083
€ <sub>21</sub>	ring (CCC str.)	1292	1416	1345	-----	10.083
€ <sub>22</sub>	δCH (wagging)	1249	1308	1225	-----	0.011
€ <sub>23</sub>	δCH (wagging)	1249	1308	1225	-----	0.011
€ <sub>24</sub>	δCH (scissoring)	1171	1231	1181	1135	6.957
€ <sub>25</sub>	δCH (scissoring)	1171	1231	1181	1135	6.957
€ <sub>26</sub>	γCH	982	1036	992	-----	0.818
€ <sub>27</sub>	γCH	982	1036	992	-----	0.818
€ <sub>28</sub>	δring (δCCC) <b>ring A</b>	953	967	872	-----	0.762
€ <sub>29</sub>	δring (δCCC) <b>ring A</b>	953	967	872	-----	0.762
€ <sub>30</sub>	γCH	875	913	850	-----	6.215
€ <sub>31</sub>	γCH	875	913	850	-----	6.215

€ <sub>32</sub>	δring (δCCC)	744	762	772	-----	2.452
€ <sub>33</sub>	δring (δCCC)	744	762	772	-----	2.452
€ <sub>34</sub>	γCC + γCH	629	669	679	-----	19.377
€ <sub>35</sub>	γCC + γCH	629	669	679	-----	19.377
€ <sub>36</sub>	γCC + γCH	436	433	458	-----	3.248
€ <sub>37</sub>	γCC + γCH	436	433	458	-----	3.248
€ <sub>38</sub>	δring (δCCC)	437	426	416	-----	3.020
€ <sub>39</sub>	δring (δCCC)	437	426	416	-----	3.020
€ <sub>40</sub>	γCC ( <b>ring A</b> ) + γCH	305	313	316	-----	0.005
€ <sub>41</sub>	γCC ( <b>ring A</b> ) + γCH	305	313	316	-----	0.005
<b>A<sub>2</sub></b>						
€ <sub>42</sub>	CH str.	3026	3395	3028	3010	0.000
€ <sub>43</sub>	ring (CC str.) + δCH	1507	1625	1521	-----	0.000

€ <sub>44</sub>	δCH	1222	1299	1259	-----	0.000
€ <sub>45</sub>	γCH	945	1025	984	-----	0.000
€ <sub>46</sub>	δring (δCCC )	864	909	955	-----	0.000
€ <sub>47</sub>	δring (δCCC ) <b>ring A</b> (clock & anticlock)	650	664	669	-----	0.000
€ <sub>48</sub>	γCC (rings <b>B</b> )	490	471	551	-----	0.000
<b>E<sub>2</sub></b>						
€ <sub>49</sub>	<b>CH str.</b>	3041	3405	3048	-----	0.000
€ <sub>50</sub>	<b>CH str.</b>	3041	3405	3048	-----	0.000
€ <sub>51</sub>	<b>CH str.</b>	3028	3395	3029	-----	0.000
€ <sub>52</sub>	<b>CH str.</b>	3028	3395	3029	-----	0.000
€ <sub>53</sub>	ring (C=C <b>str.</b> )	1583	1743	1658	-----	0.000
€ <sub>54</sub>	ring (C=C <b>str.</b> )	1583	1743	1658	-----	0.000
€ <sub>55</sub>	ring (C--C <b>str.</b> )	1452	1589	1485	1430	0.000
€ <sub>56</sub>	ring (C--C <b>str.</b> )	1452	1589	1485	1430	0.000
€ <sub>57</sub>	δCH	1401	1461	1448	-----	0.000
€ <sub>58</sub>	δCH	1401	1461	1448	-----	0.000
€ <sub>59</sub>	ring (C--C <b>str.</b> ) + δCH	1325	1426	1382	1310	0.000
€ <sub>60</sub>	ring (C--C <b>str.</b> ) + δCH	1325	1426	1382	1310	0.000
€ <sub>61</sub>	δCH	1213	1325	1200	-----	0.000
€ <sub>62</sub>	δCH	1213	1325	1200	-----	0.000
€ <sub>63</sub>	δCH	1184	1247	1171	-----	0.000
€ <sub>64</sub>	δCH	1184	1247	1171	-----	0.000
€ <sub>65</sub>	δring (δCCC) + δCH	1031	1143	1102	-----	0.000
€ <sub>66</sub>	δring (δCCC) + δCH	1031	1143	1102	-----	0.000
€ <sub>67</sub>	γCH	960	1050	1002	-----	0.000
€ <sub>68</sub>	γCH	960	1050	1002	-----	0.000
€ <sub>69</sub>	γCH	825	868	79 <sub>γ</sub>	840	0.000
€ <sub>70</sub>	γCH	825	868	79 <sub>γ</sub>	840	0.000
€ <sub>71</sub>	γCC ( <b>ring A</b> ) + γCH	749	843	771	-----	0.000
€ <sub>72</sub>	γCC ( <b>ring A</b> ) + γCH	749	843	771	-----	0.000
€ <sub>73</sub>	δring (δCCC) ( <b>rings B</b> )	679	669	653	-----	0.000
€ <sub>74</sub>	δring (δCCC) ( <b>rings B</b> )	679	669	653	-----	0.000
€ <sub>75</sub>	γCC	589	602	6 <sub>γ</sub>	-----	0.000
€ <sub>76</sub>	γCC	589	602	6 <sub>γ</sub>	-----	0.000
€ <sub>77</sub>	δring (δCCC )	547	567	557	-----	0.000
€ <sub>78</sub>	δring (δCCC )	547	567	557	-----	0.000
€ <sub>79</sub>	δring (δCCC )	417	421	448	-----	0.000
€ <sub>80</sub>	δring (δCCC )	417	421	448	-----	0.000

$\epsilon_{81}$	$\gamma_{CC}$ (rings B)	266	268	$2\wedge\epsilon$	-----	0.000
$\epsilon_{82}$	$\gamma_{CC}$ (rings B)	266	268	$2\wedge\epsilon$	-----	0.000
$\epsilon_{83}$	$\gamma_{CC}$ (rings B)	134	136	143	-----	0.000
$\epsilon_{84}$	$\gamma_{CC}$ (rings B)	134	136	143	-----	0.000

**Scaling factors:** 0.876 (CH str.); 0.96 (ring (CC) str.); 1.06 ( $\delta_{CH}$ ); 1.08 ( $\delta_{ring}(\delta_{CCC})$ ); 1.11 ( $\gamma_{CH}$ ); 1.11 ( $\gamma_{CCC}$ ); 1.03 ( $\gamma_{CC}$ ).

Special scaling factors were used for vibration modes with overlaps of different types of motion; 1.06 (ring (CCC) str. +  $\delta_{CH}$ ); 1.11 ( $\gamma_{CCC}$  +  $\gamma_{CH}$ ) or ( $\gamma_{CC}$  +  $\gamma_{CH}$ ); 1.03 ( $\gamma_{CH}$  +  $\gamma_{CC}$ ). [16]

Scaling factors: 0.96 (CH str.) for all DFT (B3LYP/6-311G) frequencies, [17].

$\gamma$ : out of plane bending vibration.

$\delta$ : in- plane bending vibration.

**Table (3): Calculated geometry for Corannulene anion and cation radical.**

Bond length (Å) and Bond angles (deg.)	This work	
	DFT Anion	DFT Cation
C <sub>1</sub> C <sub>2</sub>	<b>1.406</b>	<b>1.394</b>
C <sub>1</sub> C <sub>5</sub>	<b>1.429</b>	<b>1.449</b>
C <sub>1</sub> C <sub>9</sub>	<b>1.397</b>	<b>1.396</b>
C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	<b>1.420</b>	<b>1.430</b>
C <sub>2</sub> C <sub>8</sub>	<b>1.407</b>	<b>1.388</b>
C <sub>3</sub> C <sub>7</sub>	<b>1.392</b>	<b>1.393</b>
C <sub>7</sub> C <sub>20</sub>	<b>1.452</b>	<b>1.442</b>
C <sub>8</sub> C <sub>18</sub>	<b>1.453</b>	<b>1.450</b>
C <sub>8</sub> C <sub>19</sub>	<b>1.430</b>	<b>1.452</b>
C <sub>9</sub> C <sub>16</sub>	<b>1.429</b>	<b>1.432</b>
C <sub>9</sub> C <sub>17</sub>	<b>1.467</b>	<b>1.449</b>
C <sub>15</sub> C <sub>16</sub>	<b>1.427</b>	<b>1.423</b>
C <sub>17</sub> C <sub>18</sub>	<b>1.392</b>	<b>1.392</b>
C <sub>19</sub> C <sub>20</sub>	<b>1.413</b>	<b>1.406</b>
H <sub>16</sub> C <sub>26</sub>	<b>1.086</b>	<b>1.082</b>
H <sub>17</sub> C <sub>27</sub>	<b>1.086</b>	<b>1.081</b>
H <sub>18</sub> C <sub>28</sub>	<b>1.087</b>	<b>1.081</b>
H <sub>19</sub> C <sub>29</sub>	<b>1.087</b>	<b>1.082</b>
H <sub>20</sub> C <sub>30</sub>	<b>1.086</b>	<b>1.082</b>
< C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>5</sub>	<b>108.149</b>	<b>108.315</b>
< C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>9</sub>	<b>123.972</b>	<b>123.459</b>
< C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	<b>107.596</b>	<b>107.252</b>
< C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>8</sub>	<b>123.646</b>	<b>122.987</b>
< C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>7</sub>	<b>123.358</b>	<b>123.358</b>
< C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	<b>108.477</b>	<b>108.477</b>
< C <sub>3</sub> C <sub>7</sub> C <sub>20</sub>	<b>113.939</b>	<b>113.939</b>

< C <sub>1</sub> C <sub>9</sub> C <sub>16</sub>	<b>114.929</b>	<b>114.929</b>
< C <sub>1</sub> C <sub>9</sub> C <sub>17</sub>	<b>112.716</b>	<b>112.716</b>
< C <sub>9</sub> C <sub>16</sub> H <sub>26</sub>	<b>119.722</b>	<b>119.722</b>
< C <sub>9</sub> C <sub>16</sub> C <sub>15</sub>	<b>121.900</b>	<b>121.900</b>
< C <sub>9</sub> C <sub>17</sub> H <sub>18</sub>	<b>122.534</b>	<b>122.534</b>
< C <sub>9</sub> C <sub>17</sub> H <sub>27</sub>	<b>121.900</b>	<b>121.900</b>
< C <sub>17</sub> C <sub>18</sub> H <sub>28</sub>	<b>118.004</b>	<b>118.004</b>
< C <sub>17</sub> C <sub>18</sub> C <sub>8</sub>	<b>122.738</b>	<b>122.738</b>
< C <sub>8</sub> C <sub>19</sub> H <sub>29</sub>	<b>119.548</b>	<b>119.548</b>
< C <sub>8</sub> C <sub>19</sub> C <sub>20</sub>	<b>122.345</b>	<b>122.345</b>
< C <sub>19</sub> C <sub>20</sub> C <sub>7</sub>	<b>122.032</b>	<b>122.032</b>
< C <sub>19</sub> C <sub>20</sub> H <sub>30</sub>	<b>118.244</b>	<b>118.244</b>
<b>Dipole moment Debye</b>	<b>3.81351</b>	
<b>(U<sub>H</sub> kcal/ mol)</b>	<b>109.103</b>	<b>336.875</b>

**Table (4): Vibration frequencies and IR absorption intensities for Corannulene cation and anion radicals.**

Symmetry & description		DFT (cation)		DFT (anion)	
		Freq. cm <sup>-1</sup>	Intensity (km/mol)	Freq. cm <sup>-1</sup>	Intensity (km/mol)
<b>A'</b>					
v <sub>1</sub>	CH str. (rings B)	3076	2.559	3047	86.364
v <sub>2</sub>	CH str. (rings A)	3072	12.482	3044	211.214
v <sub>3</sub>	CH str. (ring C)	3071	3.843	3030	38.858
v <sub>4</sub>	CH str. (rings B)	3059	0.669	2991	24.903
v <sub>5</sub>	CH str. (rings A)	3057	2.067	2989	0.012
v <sub>6</sub>	ring (C--C str.) (ring D)	1638	39.043	1675	10.663
v <sub>7</sub>	ring (C--C str.)+δCH (ring C)	1610	184.770	1659	0.962
v <sub>8</sub>	ring(C--C str.)+ δCH (rings A)	1582	6.660	1645	65.334
v <sub>9</sub>	δCH (rings A & B)	1492	3.806	1536	9.229
v <sub>10</sub>	ring(CCCstr.)+δCH(rings A,C)	1477	0.366	1488	0.061
v <sub>11</sub>	δCH (rings A & B)	1456	0.407	1472	16.480
v <sub>12</sub>	ring(CCC str.)+δCH (rings A)	1454	2.780	1436	0.044
v <sub>13</sub>	δCH (rings A)	1414	15.425	1418	127.408
v <sub>14</sub>	δCH (ring C)	1348	60.207	1386	5.787
v <sub>15</sub>	δCH (rings B) r	1296	116.224	1344	101.855
v <sub>16</sub>	δCH (rings A, r` & rings C)	1281	46.683	1284	23.744
v <sub>17</sub>	δCH (rings A, r)	1217	8.348	1227	46.170
v <sub>18</sub>	δCH (rings A, r` )	1192	135.565	1213	7.830
v <sub>19</sub>	δCH (rings A, r)	1177	3.027	1169	23.779
v <sub>20</sub>	δring (δCCC)	1113	0.378	1120	64.818

v <sub>21</sub>	δring (δCCC)	1097	380.260	1104	28.658
v <sub>22</sub>	δCH (ring C)	1034	261.159	1038	2.358
v <sub>23</sub>	γCH ( <b>rings B</b> )	1022	2.120	964	2.172
v <sub>24</sub>	γCH ( <b>rings A &amp; B</b> )	1010	14.938	912	3.561
v <sub>25</sub>	γCH ( <b>ring C</b> )	911	148.596	867	9.119
v <sub>26</sub>	γCH ( <b>rings C &amp; A</b> )	885	0.844	809	133.847
v <sub>27</sub>	δring (δCCC)	861	47.958	789	22.841
v <sub>28</sub>	γCH ( <b>rings B &amp; C</b> )	812	7.259	769	2.068
v <sub>29</sub>	δring (δCCC)	764	12.452	758	39.018
v <sub>30</sub>	γring (γCCC)	747	13.653	720	10.768
v <sub>31</sub>	γring (γCCC) + γCH	655	7.486	659	4.952
v <sub>32</sub>	δring (δCCC)	636	31.315	648	0.821
v <sub>33</sub>	γring (γCCC) + γCH	597	4.464	598	0.939
v <sub>34</sub>	γring (γCCC) + γCH	584	22.087	587	1.552
v <sub>35</sub>	γring (γCCC)+ γCH ( <b>rings B</b> )	555	1.141	552	19.462
v <sub>36</sub>	γring (γCCC) + γCH ( <b>ring A</b> )	544	21.549	546	6.780
v <sub>37</sub>	δCH + δring (δCCC)	455	0.69	446	1.654
v <sub>38</sub>	δring (δCCC)	416	29.723	438	0.557
v <sub>39</sub>	δring (δCCC)	393	75.434	400	26.323
v <sub>40</sub>	γring (γCCC)	298	25.917	299	0.039
v <sub>41</sub>	γring (γCCC)	271	2.023	262	0.744
v <sub>42</sub>	γring (γCCC)	145	5.219	132	0.964
v <sub>43</sub>	γring (γCCC) ( <b>rings C &amp; A</b> )	135	4.839	94	4.341
<b>A''</b>					
v <sub>44</sub>	CH str. ( <b>rings B</b> )	3075	21.190	3040	33.602
v <sub>45</sub>	CH str. ( <b>rings A</b> )	3072	3.145	3029	219.432
v <sub>46</sub>	CH str. ( <b>rings B</b> )	3059	0.014	3022	12.531
v <sub>47</sub>	CH str. ( <b>rings A</b> )	3057	1.058	2991	182.616
v <sub>48</sub>	CH str. ( <b>ring C</b> )	3056	1.493	2989	1.137
v <sub>49</sub>	ring (C--C str.) ( <b>ring D</b> )	1652	1.708	1635	46.071
v <sub>50</sub>	ring (C--C str.) ( <b>ring C</b> )	1572	200.647	1601	1.076
v <sub>51</sub>	δCH ( <b>rings A &amp; C</b> )	1536	0.034	1522	2.605
v <sub>52</sub>	δCH ( <b>rings A &amp; C</b> )	1503	2.283	1507	23.793
v <sub>53</sub>	δCH ( <b>rings B &amp; C</b> )	1460	8.232	1482	46.819
v <sub>54</sub>	δCH ( <b>rings B, r'</b> )	1444	121.533	1437	6.644
v <sub>55</sub>	δCH ( <b>rings A</b> )	1373	62.696	1404	20.299
v <sub>56</sub>	δCH ( <b>rings A, r'</b> )	1308	181.590	1346	34.713
v <sub>57</sub>	δCH	1274	0.308	1314	3.501

v <sub>58</sub>	δCH + δCCC (rings A & C)	1247	17.615	1252	0.686
v <sub>59</sub>	δCH (rings A) + δCCC	1218	48.238	1224	37.606
v <sub>60</sub>	δCH (rings B)	1189	101.914	1182	5.209
v <sub>61</sub>	δCH (rings B)	1184	16.767	1166	12.626
v <sub>62</sub>	δCH (rings A)	1102	502.734	1124	22.348
v <sub>63</sub>	γCH (rings B & A)	1022	0.166	964	0.403
v <sub>64</sub>	γCH (rings A & C)	1005	12.582	952	0.501
v <sub>65</sub>	γCH (rings B & A)	999	1.427	925	14.433
v <sub>66</sub>	δring (δCCC)	958	8.502	896	3.292
v <sub>67</sub>	δring (δCCC) (ring C)	948	43.040	862	1.424
v <sub>68</sub>	γCH (rings A & B)	869	0.756	841	7.471
v <sub>69</sub>	δring (δCCC)	859	69.276	788	0.126
v <sub>70</sub>	γCH (rings A & B)	801	21.811	763	0.703
v <sub>71</sub>	δring (δCCC)	767	15.711	753	0.526
v <sub>72</sub>	γCC (rings B & D)	735	17.927	698	4.347
v <sub>73</sub>	δring (δCCC) (ring C)	663	0.076	666	0.000
v <sub>74</sub>	γCC (rings A & B)	643	14.671	640	4.745
v <sub>75</sub>	δring (δCCC)	613	1.599	630	120.093
v <sub>76</sub>	δring (δCCC)	563	2.736	550	2.081
v <sub>77</sub>	γCC (rings B)	537	2.908	513	1.750
v <sub>78</sub>	γCC (ring C)	505	21.541	501	6.631
v <sub>79</sub>	γCC (ring C)	437	0.079	410	4.241
v <sub>80</sub>	δring (δCCC)	412	19.098	397	7.405
v <sub>81</sub>	γCC (rings B & D)	310	2.239	381	9.237
v <sub>82</sub>	γCC (rings C & B)	276	31.755	275	1.818
v <sub>83</sub>	δring (δCCC)	183	85.543	257	3.183
v <sub>84</sub>	δring (δCCC)	22	132.860	125	0.740

**STUDYING THE VIBRATION FREQUENCIES OF CORANNULENE AND  
IT'S POSITIVE AND NEGATIVE RADICAL IONS USING QUANTUM  
MECHANICAL CALCULATIONS**

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

E.mail: [scianb@yahoo.com](mailto:scianb@yahoo.com)



**ABSTRACT.:**The vibration frequencies, IR absorption intensities and normal coordinates of the Corannulene radical cation and anion were calculated applying the MINDO/3, PM3, (DFT (B3LYP/6-311G)) quantum mechanical methods. The results allowed proper assignments for the frequencies of the experimentally known, radical cation vibrations. They provided pre estimation of the radical anion frequencies. Comparison is done for the frequencies of the ions with those of the neutral Corannulene molecules.