

## دراسة ميكانيك الكم باستعمال نظرية دالة الكثافة لبنية و استقرارية و الحركة الاهتزازية لكيوتونات البروبان الحلقي

سمير عداي سلمان

جامعة بغداد/كلية التربية للعلوم الصرفة ( ابن الهيثم )/قسم الكيمياء

استلم في: 13/نيسان/2016، قبل في: 28/حزيران/2016

### الخلاصة

في هذه الدراسة تم اجراء الحسابات باستعمال نظرية دالة الكثافة DFT على جزيئات cyclopropanone و cyclopropanetrione و cyclopropandione إذ كانت الدالة الاساس 6-31G\*\*/MP2 و بوجود الجهد المرافق B3-LYP. بينت النتائج ان هندسة الحالة المستقرة لجميع الجزيئات تعود الى مجموعة النقطة التماثلية  $C_{2v}$  إذ يحصل ازدواج تذبذبي مع الحالة الالكترونية الارضية في جزيئة  $C_3O_3$  مما يؤدي الى خفض تماثل الجزيئة الاولى من  $D_{3h}$  الى  $C_{2v}$  و ان القوة الدافعة لهذه العملية هي الوصول الى ترتيب الكتروني داخلي يتوافق مع قاعدة Hückel للانظمة الاروماتية. في هذه الدراسة ايضا تم حساب الانماط الاعتيادية للاهتزازات مع قيم ترددتها و شدد امتصاصها و تصنيفها التماثلي و اخيرا حسبت طاقة الشد الزاوي للجزيئات المذكورة بطريقة isodesmic reaction.

**الكلمات المفتاحية:** البروبانون الحلقي, البروبان الحلقي ثنائي اون, البروبان الحلقي ثلاثي اون, كيوتونات البروبان الحلقي.

## المقدمة

اعلن معهد الفلك الراديوي عام 2012 [1] عن اكتشاف وجود بعض الجزيئات ذات البنية التركيبية و الالكترونية غير الاعتيادية في الفضاء بين النجمي لسديم راس الحصان. و تأتي اهمية هذا الاكتشاف من حقيقة عدم وجود هذه المركبات على الارض, إذ تشكل ظروف الحواء الشديد و درجات الحرارة المتطرفة و المجالات الجاذبية و المغناطيسية القوية فضلا عن الاشعاعات المؤينة دور في استقرارية هذه المركبات غير الاعتيادية, ان اكتشاف مثل هذا النوع من المركبات يعمل على زيادة معرفتنا و فهمنا لنشؤ و تطور الجزيئات الحيوية و حتى امكانية وجود الحياة على كواكب اخرى, وفي بعض الحالات مثلا اكتشاف و جوب  $C_{60}, C_{70}$  bucky balls يتجلى احتمال ان تكون لهذه الاكتشافات اهمية صناعية و اقتصادية كبيرة على المديين المتوسط و البعيد في اقل الاحوال.

ربما تكون الاهمية الاكبر في مثل هذه الاكتشافات في فتح افاق جديدة حول فهم حركية بعض التفاعلات الكيميائية التي تؤدي فيها هذه المركبات دور الوسيط غير المستقرة عالية الفعالية ذات الاعداد القصيرة جدا ضمن الظروف التجريبية وان ادراك هذه الحقيقة يساهم في زيادة قدرتنا على توجيه التفاعلات القديمة في اتجاهات جديدة كليا [2].

يكون cyclopropanone عبارة عن مركب غير مستقر درجة انصهاره  $90^{\circ}C$ - يحضر من تفاعل ketene مع diazomethane بدرجة حرارة  $145^{\circ}C$ [3:5]- ويؤدي دورا مهما كمركب وسطي في العديد من التفاعلات العضوية [6] مثل اعادة ترتيب [7]Favorskii, فضلا عن دوره في تفاعلات الاضافة الحلقية و التي يدخل فيها كثنائي قطب من نوع 1,3 مع الداينينات الحلقية [8,9]. تناولته العديد من الدراسات النظرية حول السلوك التوتومري له و لمشتقاته [10,11] فضلا عن استقراريته [12] و كذلك بعض معقدات التاصر الهيدروجيني له [13].

المركب cyclopropandione هو مركب غير محضر كما ان الدراسات النظرية عليه قليلة جدا و لم يتم البحث في تركيبه و صفاته لحد الان لكن الدراسة [14] تناولته كاحد متشاكلات الصيغة الوضعية  $C_3H_2O_2$  في دراسة سطح طاقة الجهد potential energy surface PES لمتشاكلاته.

المركب Cyclopropantrione و الذي يمكن اعتباره كثنائي حلقي cyclic trimer لاول اوكسيد الكربون هو ايضا غير محضر و غير مثبت التركيب, بعض الدراسات مثل [15] رجحت وجوده كوسطي عند درجات الحرارة الواطئة جدا ( $2^{\circ}K$ ) من خلال طيف microwave إذ اقترحت انه ربما يكون ذو بنية مستوية تنتمي الى المجموعة التماثلية  $C_{3h}$  في حين بينت دراسات اخرى ان هذه البنية قد لا تكون مستقرة و انها تمثل حالة انتقالية إذ تكون استقرارية الحالة الثلاثية للجزيئة اكبر من استقرارية حالتها الاحادية [16].

تهدف هذه الدراسة الى استقصاء البنية و الاستقرارية و الخواص الطيفية للحركة الاهتزازية لكيتونات البروبان الحلقي من خلال عمل حسابات DFT للهندسة المنظمة و تحليل الحركة الاهتزازية لهذه الجزيئات في حالتها الارضية.

## الطرائق الحسابية

تم انجاز هذه الدراسة باستعمال Hyperchem package 8.0.8 الخاصة للعمل مع انظمة Windows. اجريت حسابات DFT باستعمال الدالة الاساس  $6-31G^{**}$  ضمن RHF المدمجة مع تصحيح MP2 و بوجود الجهد المرافق B3-LYP. تم اجراء تنظيم لهندسة الجزيئات المستعملة في الدراسة حسب خوارزمية Polak-Ribiere إذ كان RMS  $gradient = 0.1 \text{ Kcal/A}^0 \text{ mole}$ . بعد الوصول الى الهندسة المنظمة للجزيئات في حالتها الارضية جمعت البيانات حول قيم اطوال الاواصر و الزوايا و طاقة الحالة الارضية و عزم ثنائي القطب و من ثم تم حساب طاقة الشد الزاوي لكيتونات البروبان الحلقي المدروسة بطريقة isodesmic reaction من خلال جزيئات ethane و propane و acetone كجزيئات مرجعية طبقت بياناتها كما ذكر اعلاه بالنسبة لكيتونات البروبان الحلقي.

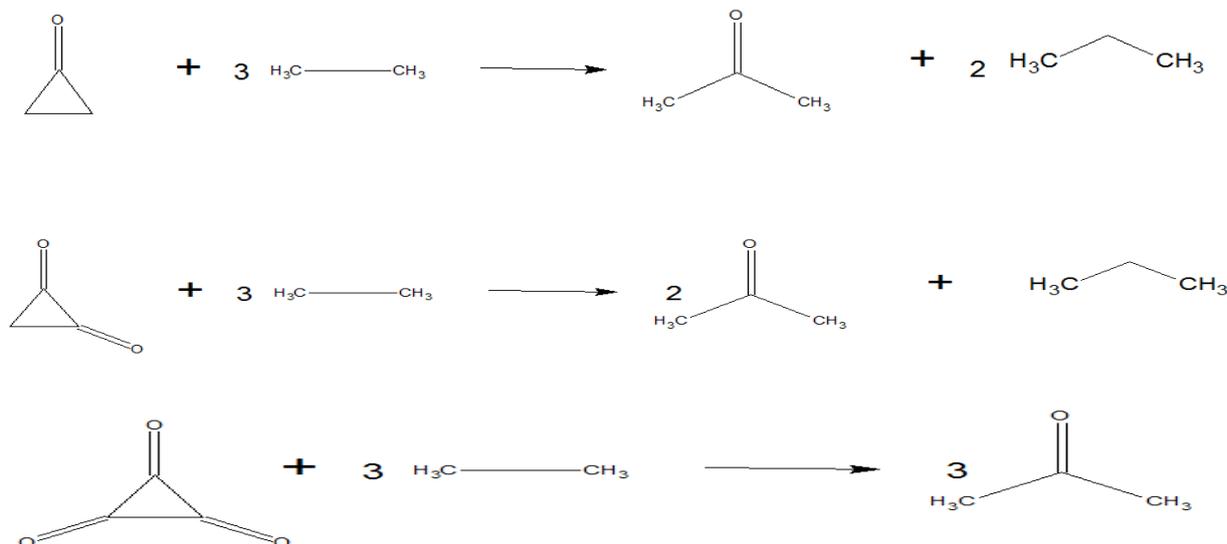
الحاسبة المستعملة في هذه الدراسة كانت من نوع HP/core i5, Ram/8giga-byte

## المنافشة

تشير حسابات تنظيم هندسة الجزيئة الى ان جميع الجزيئات المدروسة تعود الى مجموعة النقطة التماثلية  $C_{2v}$  التي تتضمن اربعة عناصر اساسية للتماثل هي  $(E, \sigma_v, \sigma_h, C_2)$  و بالرغم من ان هذا متوقع اصلا من بنية جزيئات  $C_3H_4O$  و  $C_3H_2O_2$  الا انه بالنسبة لجزيئة  $C_3O_3$  فان تلك النتيجة تعد مفاجئة إذ ان البنية الاولية للجزيئة ترجح انها تنتمي الى مجموعة النقطة التماثلية  $D_{3h}$  و التي تمتلك عددا اكبر من عناصر التماثل تشمل  $(E, 2C_3, 3C_2, 3\sigma_v, \sigma_h, 2S_3)$ . الذي يحصل ان حلقة ذرات الكربون التي كانت تشكل مثلث متساوي الاضلاع في البنية  $D_{3h}$  كانت قد تشوهت قليلا لتأخذ و ضعية مثلث متساوي الساقين و في الوقت نفسه فان مجموعة الكربونيل و التي يمر بها عنصر التماثل المتبقي  $C_2$  تميل الى الاستطالة قليلا إذ ان طولها لا يعود مساويا لأطوال اواصر مجموعتي الكربونيل الاخرى. والجدول (1) يبين البيانات الهندسية للجزيئات المدروسة في حالتها الارضية.

فضلا عن ذلك فان انكسار تماثل الجزيئة  $C_3O_3$  يؤدي الى اعادة توزيع شحنتها ليتكون لها عزم ثنائي قطب مقداره  $0.0056 \text{ D}$  بعد ان كانت تمتلك توزيع تماثل للشحنة يؤدي الى حذف اي عزم قطب تمتلكه.

الجدول (2) يبين قيم الطاقة الكلية و الطاقة الكلية المضاف اليها حد التصحيح MP2 و طاقة نقطة الصفر ZPE و عزم ثنائي القطب فضلا عن طاقة الشد الزاوي بغياب و بوجود حد التصحيح MP2 إذ تم حساب طاقة الشد الزاوي بطريقة isodesmic reaction و باستعمال جزيئة الايثان كمادة متفاعلة و جزيئتي البروبان و الاسيتون كمواد ناتجة إذ ادرجت القيم الطاقية لهذه المركبات في الجدول (3) ضمن مبدأ انه يمكن حساب طاقة الشد الزاوي لنظام جزيئي معين كفرق طاقة بين حالة متفاعلات تحتوي على المجاميع في بيئة الشد الزاوي وبين النواتج التي تحتوي على المجاميع نفسها بغياب الشد الزاوي و بطريقة مشابهة لقانون Hess في الكيمياء الحرارية. ان التفاعلات المفترضة التي تمت بموجبها الحسابات كانت:



تشير النتائج المستحصلة ان طاقة الشد الزاوي تزداد حسب الترتيب



ولكن عند اخذ تصحيح MP2 بالحسبان فان الترتيب يكون



كذلك بالنسبة لطاقة نقطة الصفر إذ يلاحظ ان ZPE المحسوبة بالطريقة الوضعية من خلال اسهامات الاواصر و الموصوفة في المصدر [17] تتبع نفس ترتيب طاقة الشد الزاوي نفسها المحسوبة بدون تصحيح MP2 اما تلك المحسوبة حسب تصحيح MP2 تاخذ نفس ترتيب طاقة الشد الزاوي المصححة. ان النتائج اعلاه تدفعنا الى الاستنتاج ان جزيئة  $\text{C}_3\text{O}_3$  تعاني من تأثير مشابه الى تأثير جان-تيلير إذ تزوج الحركة الاهتزازية للجزيئة مع الحالة الالكتروني الثلاثية المثارة في الجزيئة بطريقة تؤدي الى انخفاض مستوى طاقة الحالة الثلاثية المثارة دون مستوى طاقة الحالة الارضية الاصلية وان القوة الدافعة لهذه العملية هي الوصول الى نظام حلقي اروماتي مستقر حسب قاعدة Hückel يكون فيه عدد الكترونات  $\pi$  يساوي 2 واحد على كل ذرة كاربون اما ذرة الكاربون الثالثة فتفقد الكترونها لصالح ذرة الاوكسجين المرتبطة بها مما يؤدي الى زيادة استقطاب مجموعة الكاربونيل الثالثة و من ثم تولد عزم ثنائي قطب لكل الجزيئة. الاهتزاز الامتطاطي لمجموعة الكاربونيل في cyclopropanone ياخذ النمط التماثلي  $A_1$  و بتردد  $1851.51 \text{ cm}^{-1}$  و تكون شدة امتصاصه  $289.81 \text{ km/mole}$  و تمثل شدة الامتصاص الاعلى بين الانماط الاهتزازية الاخرى و يكون هذا النمط فعالا في طيفي رامان و IR.

تظهر في مركب cyclopropanedione حزمنا امتصاص تعودان الى الاهتزاز الامتطاطي لمجموعتي الكاربونيل الاول غير تماثل عند  $1762.11 \text{ cm}^{-1}$  ذو صنف تماثلي  $B_2$  و الاخر تماثل عند  $1835 \text{ cm}^{-1}$  يعود الى الصنف التماثلي  $A_1$  و تكون شدة الامتصاص لهما  $247.92, 55.41 \text{ km/mole}$  على التوالي و هما فعالان في طيفي رامان و الاشعة تحت الحمراء. يلاحظ ان كلا الترددان كان اقل من تردد مجموعة الكاربونيل في مركب cyclopropanone إذ يعود ذلك الى ان تجاور مجموعتي الكاربونيل يعمل على انزياح الكثافة الالكترونية باتجاه ذرتي الاوكسجين لغرض تقليل التنافر الحاصل مما يؤدي الى نقصان رتبة كلا الاصرتينو ومن ثم نقصان ثابت القوة الخاص بهما [18], الامر الذي يجعل التردد الامتطاطي لهما يكون اقل مما هو عليه في مركب cyclopropanone.

في مركب cyclopropantrione ذو النمط التماثلي  $C_{2v}$  و الذي ذكرنا سابقا ان احد مجاميع الكربونيل فيه تميل الى الاستقطاب فان التردد الامتصاصي لهذه المجموعة يظهر عند  $1384.62\text{ cm}^{-1}$  و يكون ذا نمط تماثلي  $A_1$  و شدة امتصاص  $6.704\text{ km/mole}$  إذ ان القيمة الواطنة لهذا التردد تعود الى ان استقطاب مجموعة الكربونيل اكسبها الكثير من صفة الاصرة المفردة إذ اصبحت اقرب الى تردد اهتزاز اصرة C-O منها الى تردد اهتزاز اصرة C=O. بالنسبة الى مجموعتي الكربونيل الاخرى فانهما يشتركان في اهتزازين امتصاصيين الاول غير متماثل ينتمي الى الصنف التماثلي  $B_2$  عند  $1941.91\text{ cm}^{-1}$  و بشدة امتصاص  $56.33\text{ km/mole}$  و الاخر متماثل يقع عند  $2310.19\text{ cm}^{-1}$  و صنفه التماثلي  $A_1$  و شدة امتصاصه  $32.67\text{ km/mole}$ . ان ظهور هذين التردددين بهذه القيمة العالية يعود الى نقصان طول مجموعتي الكربونيل مما ادى الى زيادة ثابت قوتيهما و بصورة عامة يلاحظ ان شدة الانماط الاهتزازية لمجاميع الكربونيل في هذا المركب تكون واطئة عموما و هذا يعود بالاساس الى ان الانتقالات الاهتزازية فيه تكون ممنوعة تماثليا [14] بالاصل و ان انكسار تماثل الجزيئة ادى الى السماح بظهور هذه الاهتزازات و لكن بشدة واطئة علما ان جميع هذه الاهتزازات تكون فعالية في طيفي رامان و الاشعة تحت الحمراء.

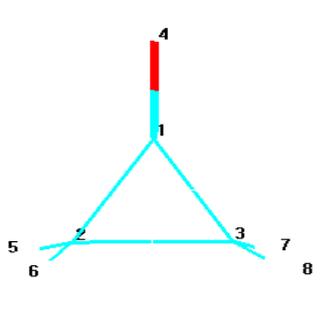
## المصادر

- 1- Jérôme,P.;( 2012), The discovery of a new interstellar molecule confirms the existence of a petroleum refinery in our galaxy, Institut de Radioastronomie Millimétrique, Université Pierre et Marie Curie, France.
- 2- Belloche, A.; Garrod, R. T.; Muller, H. S. P.; and Menten, K. M.,( 2014 ), Detection of a branched alkyl molecule in the interstellar medium: iso-propyl cyanide, Science, 345, 6204.
- 3- Turro, N. J.; and Hammond, W. B.; (1968), Preparation and characterization of cyclopropanone, methylcyclopropanone, 2,2-dimethylcyclopropanone and tetramethylcyclopropanone, Tetrahedron, 24(18), 6017-6028.
- 4- Rothgery,E. F.; Holt , R. J.; and McGee, H. A.:( 1975 ), Cryochemical synthesis and molecular energetics of cyclopropanone and some related compounds, J. Am. Chem. Soc., 97(17), 4971-4973.
- 5- Turro, N. J.:( 1969 ), Cyclopropanones, Acc. Chem. Res., 2(1), 25-32.
- 6- Arthur,C.:( 1960 ), Organic Reaction Volume XI (1 ed.), Wiley-Interscience, NewYork.
- 7- Turro, N. J.; Edelson, S. S.; Williams, J. R.; Darling , T. R.; and Hammond, W. B.; (1969), Cyclopropanones. XII. Cycloaddition reactions of cyclopropanones, J. Am. Chem. Soc., 91(9), 2283-2292.
- 8- Edelson, S. S.; and Turro, N. J.:( 1970 ), Cyclopropanones. XVII. Kinetics of the cycloaddition reaction of cyclopropanones with 1,3-dienes, J. Am. Chem. Soc., 92(9), 2770-2773.
- 9- Cramer, C. J.; and Barrows, S. E.:( 2000 ), Quantum chemical characterization of cycloaddition reactions between 1,3-butadiene and oxyallyl cations of varying electrophilicity , Jour. of Phys. Org Chem., 13, 176-186.
- 10- El-Alali, A.; Marashdeh,A.; and Khalil, S.:( 2003 ), "A Theoretical Study of Substituted Stepwise Fluorinated Cyclopropanone Keto-Enol System", Verlag der Zeitschrift für Naturforschung, Tübingen, 932, 749-754.
- 11- Rout,C.; Jain,S. K.; Sharma, N. ; and Rastogi, R. C.:( 2006 ), Enolization of Cyclopropanone and Cyclopropanethione:A Theoretical Study, Internet Electronic Journal of Molecular Design, 5, 387-402.
- 12- Cui, J.; ( 2014 ), Dissociation of cyclopropanone molecule and ion, Department of Electrical Engineering, 5 (2), 132-138.

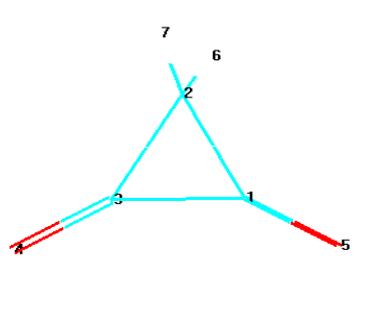
- 13- Tanaka,N.; Urashima, Y.; Nishikiori, H.; and Fujii, T.:( 2003 ), Ab initio and Density Functional Studies on Cyclopropanone Complexes with HF and HCl, Internet Electronic Journal of Molecular Design, 2, 723–731.
- 14- Ramkissoon,C.; Szórád,J.; Rágyanszki,A.; K. Gerlei, Fiser, B. ; Szóri, M.; Csizmadia,G.; Knak Jensen ,S.; and Viskolcz,B. ; (2015 ), Screening Constitutional Isomers of C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> for Thermodynamic Properties Obtained from Systematic Electron Structure Calculations, Chemical Informatics, 1(2:8), 1-5.
- 15- Rezaei,M.; Sheybani-Deloui,S.; Moazzen-Ahmadi, N.; Michaelian, K. H.; and McKellar, A. R. W.; (2013), Communication: Spectroscopic evidence for a planar cyclic CO trimer, The Journal of Chemical Physics, 138, 071102.
- 16- Bao, X. ; Zhou ,X. ; C. Lovitt, Venkatraman, A.; Hrovat, D.; Gleiter, R.; Hoffmann R.; and Borden,W.:( 2012 ), Molecular Orbitals of the Oxocarbons (CO)<sub>n</sub> , n = 2–6. Why Does (CO)<sub>4</sub> Have a Triplet Ground State?, J. Am. Chem. Soc., 134, 10259–10270.
- 17- Rahal,M.; Hilali,M.; Hammadi, A.; El Mouhtadi M.; and El Hajbi, A.:(2001), Calculation of vibrational zero-point energy, jour. Of molec. Struc. (Theochem), 572, 73-80.
- 18- Gunasekaran,S.; Natarajan, R. K.; Rathikha R.; and Syamala,D.; (2005), Vibrational spectra and normal coordinate analysis of nalidixic acid, Indian journal of Pure and Applied Physics, 43, 503-508.

جدول (1) a-البيانات الهندسية و التقييم للجزيئة C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>O

coordinate	Value	Unit
1-2, 1-3	1.485	A <sup>0</sup>
2-3	1.589	A <sup>0</sup>
1-4	1.218	A <sup>0</sup>
2-5, 2-6, 3-7, 3-8	1.090	A <sup>0</sup>
1-3-2, 1-2-3	57.65	Deg.
2-1-3	64.70	Deg.

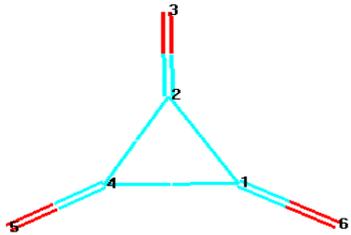

جدول (1) b- البيانات الهندسية و التقييم للجزيئة C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

coordinate	Value	Unit
1-2, 2-3	1.540	A <sup>0</sup>
1-3	1.501	A <sup>0</sup>
3-4, 1-5	1.214	A <sup>0</sup>
2-6, 2-7	1.092	A <sup>0</sup>
3-1-2, 1-3-2	60.79	Deg.
1-2-3	58.42	Deg.



جدول (1) c- البيانات الهندسية و الترقيم للجزيئة  $C_3O_3$ 

coordinate	Value	Unit
2-3	1.351	$A^0$
1-6, 5-4	1.162	$A^0$
1-2, 2-4	1.651	$A^0$
1-4	1.476	$A^0$
1-2-4	53.34	Deg.
2-4-1, 2-1-4	63.33	Deg.



## جدول (2) حسابات الطاقة و عزم ثنائي القطب للجزيئات المدروسة

Molecule	Tot. E.(Kcal/mol)	Tot. E.+ MP2 E.(Kcal/mol)	empirical ZPE(Kcal/mol)	ZPE(Kcal/mol)
$C_3H_4O$	-120340.871	-120896.814	40.510	37.962
$C_3H_2O_2$	-166744.905	-167474.861	29.269	24.886
$C_3O_3$	-213149.602	-214075.677	18.028	9.658
Molecule	strain E(Kcal/mol)	strain EMP2(Kcal/mol)	Dipole Moment (Debye).	
$C_3H_4O$	44.902	42.261	2.8499	
$C_3H_2O_2$	67.059	46.864	2.5933	
$C_3O_3$	88.553	28.698	0.0056	

## جدول (3) حسابات الطاقة للجزيئات المستعملة لحساب طاقة الشد الزاوي بطريقة isodesmic reaction

Molecule	Tot. E.(Kcal/mol)	Tot. E.MP2(Kcal/mol)
Ethane	-50058.643	-50334.967
Propane	-74711.837	-75120.442
Acetone	-121138.028	-121703.092

جدول (4) الانماط الاعتيادية للتذبذب لجزيئة  $C_3H_4O$ 

n	F(cm <sup>-1</sup> )	int.(km/mol)	symmetry	n	F(cm <sup>-1</sup> )	int.(km/mol)	Symmetry
1	314.59	4.86616	B1	10	1097.56	0.60995	B1
2	479.38	3.67703	B2	11	1156.49	0.16634	A2
3	662.99	0.01137	A2	12	1430.35	5.17707	B2
4	689.72	1.81541	A1	13	1441.73	0.31876	A1
5	704.14	1.44948	B1	14	1851.51	289.8114	A1
6	932.2	124.4998	B2	15	3123.22	0.08177	A1
7	1007.16	2.41902	A1	16	3127.28	3.10342	B2
8	1035.37	22.11987	A1	17	3206.54	0.01095	A2
9	1065.06	5.21194	B2	18	3217.32	3.27084	B1

جدول (5) الانماط الاعتيادية للتذبذب لجزيئة  $C_3H_2O_2$ 

n	F(cm <sup>-1</sup> )	int.(km/mol)	symmetry	n	F(cm <sup>-1</sup> )	int.(km/mol)	Symmetry
1	160.6	13.255	B1	9	1032.63	0.145	A2
2	211.54	0.139	A2	10	1048.32	14.864	B2
3	286.89	2.814	A1	11	1366.36	19.820	A1
4	503.68	0.915	B1	12	1762.11	247.920	B2
5	508.97	0.690	B2	13	1835.07	55.418	A1
6	687.16	20.412	B2	14	3066.74	6.226	A1
7	761.97	27.592	A1	15	3145.82	0.221	B1
8	1015.34	136.451	A1				

جدول (6) الانماط الاعتيادية للتذبذب لجزيئة  $C_3O_3$ 

n	F(cm <sup>-1</sup> )	int.(km/mol)	symmetry	n	F(cm <sup>-1</sup> )	int.(km/mol)	Symmetry
1	328.04	0.005	A2	7	639.15	0.925	B1
2	362.2	0.799	A1	8	1043.43	15.184	B2
3	419.21	6.491	B1	9	1168.12	24.792	A1
4	421.68	2.420	B2	10	1384.62	6.704	A1
5	551.87	21.255	A1	11	1941.91	56.333	B2
6	636.61	0.096	B2	12	2310.19	32.665	A1



# Quantum Mechanical Study Using the DFT Method of the Structure, Stability and Vibrational Motion of the Ketones of Cyclopropane

Samir Addy Salman

Dept. of Chemistry/ College of Education for Pure Science (Ibn Al-Haitham)/University of Baghdad

Received in: 13/April/2016, Accepted in: 28/June/2016

## Abstract

In this study a DFT calculation on cyclopropanone, cyclopropanone, cyclopropanone and cyclopropanone molecules was performed using the basis function 6-31G \*\* / MP2 and exchange correlation potential B3-LYP. The results showed that the ground state of all molecules geometry belong to the point group  $C_{2v}$  where a vibronic coupling between the vibrational motion with the electronic ground state in the molecule  $C_3O_3$  this leads to a reduction in symmetry of the molecule from  $D_{3h}$  to  $C_{2v}$ , the driving force of this process is accessing to the electronic configuration complies with Hückel aromatic systems with two electrons. Also in this, study the normal modes of vibration, frequencies, intensities and symmetry species. Finally the strain angular energy of molecules was calculated in a manner of isodesmic reaction.

**Key words:** cyclopropanone, cyclopropanone, cyclopropanone, cyclopropane ketones.