

NOTIZEN

Dipolmoment des 2-Methylfurans

U. ANDRESEN und H. DREIZLER

Abteilung Chemische Physik im Institut für Physikal. Chemie der Universität Kiel

(Z. Naturforsch. 25 a, 570 [1970]; eingegangen am 4. März 1970)

Das Mikrowellenspektrum des 2-Methylfurans, $C_4H_3O-CH_3$, ist von NORRIS und KRISHER¹ untersucht worden. Dabei ergaben sich die Rotationskonstanten und die Parameter der internen Rotation. Ergänzend wurde jetzt das Dipolmoment bestimmt.

Dazu wurden mit einem üblichen 100 kHz-Stark-Modulations-Spektrographen^{2,3} mit automatischen Frequenzmarken mehrere Linien im X-Band vermessen, die gut sichtbar waren. Das elektrische Feld wurde mit dem $J=0 \leftarrow J=1$ -Übergang des OCS geeicht. Dabei wurde der Wert von $0,7152 \text{ D}$ ⁴ für das Dipolmoment zugrunde gelegt. Die Meßgenauigkeit betrug $\pm 0,03 \text{ MHz}$.

$J_{k-k+} \leftarrow J'_{k'-k'}$	Torsions-Spezies	ν_{exp} [MHz]
$1_{11} \leftarrow 0_{00}$	A	11 358,74
	E	11 355,79
$2_{12} \leftarrow 1_{01}$	A	16 489,89
	E	16 487,35
$2_{02} \leftarrow 1_{01}$	A	12 093,56
	E	12 093,56

Tab. 1.

Die Anpassung des Dipolmoments wurde auf der Basis des starren asymmetrischen Kreisels vorgenommen. Dazu wurden sowohl die $M=1$ - als auch die $M=0$ -Komponenten obiger Linien der A-Spezies benutzt. Die Ablagen der Stark-Satelliten konnten auf $\pm 0,05 \text{ MHz}$ genau angepaßt werden. Es ergaben sich folgende Werte

$$\begin{aligned} |\mu_a| &= 0,31 \pm 0,04 \text{ D}, \\ |\mu_b| &= 0,57 \pm 0,02 \text{ D}, \\ |\mu| &= 0,65 \pm 0,03 \text{ D}. \end{aligned}$$

¹ W. G. NORRIS u. L. C. KRISHER, J. Chem. Phys. **51**, 403 [1969].

² H. D. RUDOLPH, Z. Angew. Phys. **13**, 401 [1961].

³ U. ANDRESEN u. H. DREIZLER, in Vorbereitung.

Unter der Annahme der Struktur des Furanringes nach⁵ und einer symmetrischen Methylgruppe mit $CH=1,091 \text{ \AA}$ und $\angle CCH=109,5^\circ$ wurden der Abstand $CC(\text{Methyl})$ und der Winkel $OCC(\text{Methyl})$ optimisierend berechnet. Mit den Rotationskonstanten aus¹, die auf 0,04% angenähert wurden, ergab sich

$$CC(\text{Methyl}) = 1,52 \text{ \AA}, \quad \angle OCC(\text{Methyl}) = 110,9^\circ.$$

In Abb. 1 ist die Hauptachsenlage des Moleküls angegeben. Für die Lage der $CC(\text{Methyl})$ -Bindung, die hier kollinear mit der Symmetrieachse der Methylgruppe angenommen wurde, ergibt sich

$$\begin{aligned} \lambda_a &= 0,9941, & \lambda_b &= 0,1084, \\ \alpha &= 0,05428, & \beta &= 0,00239^6. \end{aligned}$$

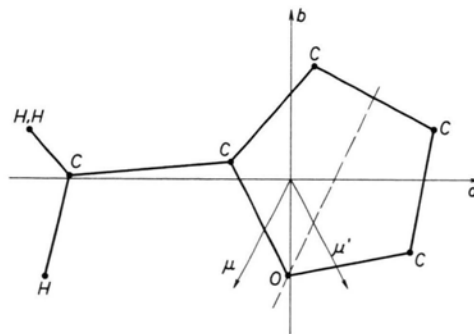


Abb. 1. Hauptachsenlage des 2-Methylfurans mit den beiden möglichen Lagen des Dipolmoments μ und μ' .

Für die Orientierung des Dipolmoments ergeben sich zwei mögliche Richtungen. Experimentell läßt sich erst durch die Untersuchung des Stark-Effekts einer isotopen Form von 2-Methylfuran eine Wahl treffen.

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für Sachmittel und dem Rechenzentrum der Universität Kiel.

⁴ J. S. MUENTER, J. Chem. Phys. **48**, 4544 [1968].

⁵ B. BAK, D. CHRISTENSEN et al., J. Mol. Spectr. **9**, 124 [1962].

⁶ Aus den Werten von α und β aus¹ ergibt sich eine Winkelsumme von $92,55^\circ$.