

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, $C_4H_6O-CH_3$, 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 D⁴ für das Dipolmoment zugrunde gelegt. Die Meßgenauigkeit betrug $\pm 0,03$ MHz.

$J_{k-k_+} \leftarrow J'_{k'-k'_+}$	Torsions-Spezies	v_{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 $\pm 0,05$ 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 $OCC(\text{Methyl})$ optimierend berechnet. Mit den Rotationskonstanten aus¹, die auf 0,04% angehähert 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 kolinear mit der Symmetrieachse der Methylgruppe angenommen wurde, ergibt sich

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

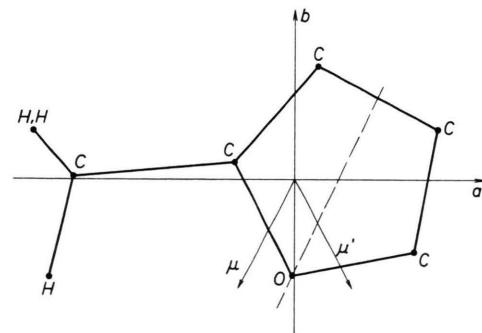


Abb. 1. Hauptachsenlage des 2-Methylfurans mit den beiden möglichen Lagen des Dipolmoments μ und μ' .

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 $92,55^\circ$.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.