

## 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 KRISHER<sup>1</sup> 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<sup>2, 3</sup> 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 D<sup>4</sup> für das Dipolmoment zugrunde gelegt. Die Meßgenauigkeit betrug  $\pm 0,03$  MHz.

$J_{k-k+} \leftarrow J'_{k'-k'+}$	Torsions-Spezies	$\nu_{\text{exp}}$ [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

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

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

<sup>2</sup> H. D. RUDOLPH, Z. Angew. Phys. **13**, 401 [1961].

<sup>3</sup> U. ANDRESEN u. H. DREIZLER, in Vorbereitung.

Unter der Annahme der Struktur des Furanringes nach<sup>5</sup> 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 aus<sup>1</sup>, 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 kolinear mit der Symmetrieachse der Methylgruppe angenommen wurde, ergibt sich

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

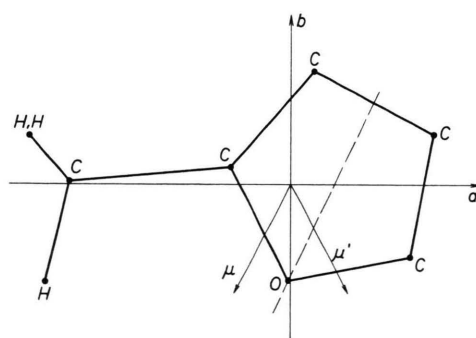


Abb. 1. Hauptachsenlage des 2-Methylfurans mit den beiden möglichen Lagen des Dipolmoments  $\mu$  und  $\mu'$ .

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

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

<sup>4</sup> J. S. MUENTER, J. Chem. Phys. **48**, 4544 [1968].

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

<sup>6</sup> Aus den Werten von  $\alpha$  und  $\beta$  aus<sup>1</sup> ergibt sich eine Winkelsumme von  $92,55^\circ$ .

