



ラマン活性モード

		回転	並進
アントラセン	Ag	3	0
	Bg	3	0
TNB	Ag	1	1
	Bg	2	2

測定結果などを参考として帰属を行なった結果、図の1～10のラマンバンドが格子振動によるものと考えられ、その中で“8”のバンドが並進的振動によるものである可能性のあることがわかった。

17. 気体電子線回折実験による分子構造の決定

神保秀之

気体電子線回折装置を用いて SiBr_4 , CH_3NH_2 , $(\text{CH}_3)_3\text{COCH}_3$ の気相における分子構造の決定を行った。また常温で蒸気圧の低い分子の実験を容易にするために高温ノズルの製作を行った。発表では特に *t*-ブチル-メチル-エーテルの構造決定について述べる。

今回試料となった *t*-Bu-Me-エーテルは、マイクロ波分光による研究が広島大の林氏らによって行われ結合角 $\angle \text{COC}$ の値が直線に近いのではないかという疑問が提出された。そこでこの点を明らかにするのに有効な手段、つまり気体電子線回折法による分子構造の決定を行うことにした。

加速電圧 36 kV (波長にして 0.064 Å) の電子線により、試料の回折写真を撮影した。写真の黒化度をフォトメトリにより測定し、各散乱角に対する電子の全散乱強度を求め、さらに分子散乱強度に直しそれに対する最小二乗法を行い分子の構造パラメータを求めた。解析においては Me 基, *t*-Bu 基の配向性や対称性および $r(\text{C-H})$, $\angle \text{HCH}$ の値を仮定し、独立パラメータとして $r(\text{C-O})$, $r(\text{C-C})$, $\angle \text{COC}$, $\angle \text{CCC}$ および全体のインデックスを可変として最小二乗法を行った。結果として注目していた $\angle \text{COC}$ の値は 119.9° (7) となった。これはマイクロ波分光による予想と異なる。この値はジメチルエーテルの $\angle \text{COC}$ の値 111.8° (2) に比べ 8° 近く大きな値で妥当な値と考えられる。