

初めに、 α ab initio計算で、安定な電子状態の波数と、 α ab initio線の波数を算出し、 α 波数を予想し、の広範囲のスペクトル探査を行った。探査の結果、強く見られるスペクトルが、 α ab initio計算から得られた波数の範囲に一致するものが見つかった。

表 3 に示したように、水錯体の 3 つのメチル基の V_3 はモノマーと比較してすべて低くなっていることがわかった。

メチル基内部回転によるエネルギー準位の分裂

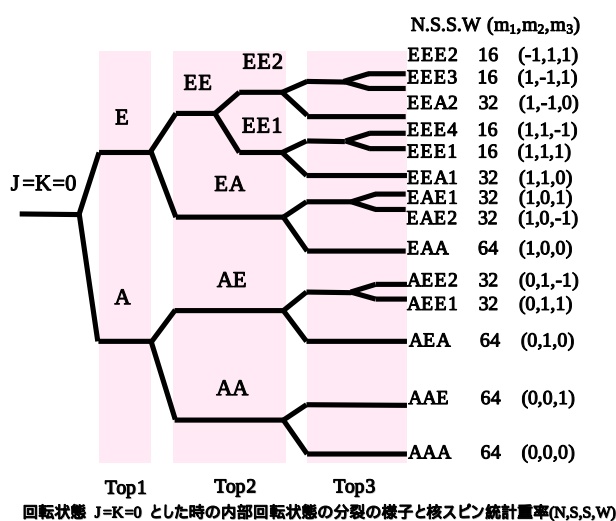


図 2

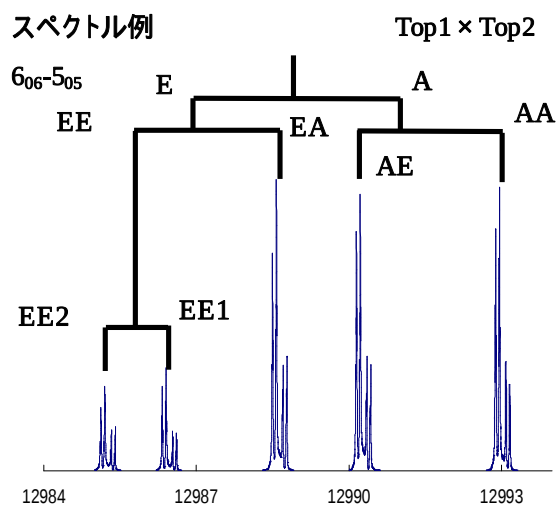


図 3

表 1 N,N-ジメチルアセトアミド-水錯体の主な分子定数(in MHz)

		メチル基の内部回転の効果による定数			
		TopY'		TopY	TopX
A_1	4641.5472(19)	A_2	2.9197(29)	A_4	0.3333(22)
B_1	1235.1716(67)	B_2	0.2604(24)	B_4	0.2415(71)
C_1	995.6601(59)	C_2	0.01222(67)	C_4	0.009087(25)
χ_{aa}	2.0765(44)	q_2	147.0408(19)	q_4	40.1988(60)
$\chi_{bb}-\chi_{cc}$	6.8399(39)	s_2	40.7228(50)	s_4	-29.1660(91)
				s_6	0.1306(46)

表 2 N,N-ジメチルアセトアミド-水錯体の方向余弦

	TopY'	TopY	TopX
λ_a	0.6862(64)	0.3410(45)	-0.41889(54)
λ_b	0.7274(61)	-0.9401(16)	0.90804(25)

表 3 N,N-ジメチルアセトアミド-水錯体とモノマーのメチル基の内部回転ポテンシャル障壁の比較

$V_3[\text{cm}^{-1}]$	TopY'	TopY	TopX
水錯体	162.83(58)	196.57(84)	629.58(13)
モノマー	180.35(79)	237.32(41)	671.85(24)
V_3	17.52	40.75	42.27