

○尾崎芳昭(名工大)

[序] NaCl (100) 面に吸着したメタン分子の構造や回転運動に関して、Quattrocciら<sup>1)</sup>によって赤外スペクトルで調べられた。ここでは、分子間ポテンシャルに基づく計算から対応する分子配向や回転運動を明らかにする。

[方法] 正四面体型分子が平面上で正方格子に並ぶとき、回転ポテンシャルは次のように書ける。

$$V(\omega) = \beta_4 V_4^{sc}(\omega) + \beta_6 V_6^{sc}(\omega) \quad (1)$$

ここで、 $\omega$ は分子の配向を示すオイラー角を示す。係数 $\beta_4$ 、 $\beta_6$ の比や符号により、

回転状態は $T_d$ 、 $D_{2d}(2)$ 、 $C_{2v}(4)$ の中の1つの配向が安定となる。

[結果] 2個のプロトンが吸着面に近づく形（いわゆるdipodの形）である $T_d$ あるいは $D_{2d}(2)$ で配列するとき、中心分子の吸着面に垂直な軸のまわりでの回転角に対するエネルギー変化を表したのが、図1あるいは図2である。後者で大きな障壁をもつ。文献1)で示されているのは2つ目の $D_{2d}(2)$ である。もう1つ提案されている、3個のプロトンが表面に近づくtripodの姿勢と正確に対応するものはないが、3つ目の姿勢 $C_{2v}(4)$ にかなり近い。それぞれトンネル分裂が現れる。回転エネルギーが直接的に測定されていないため、どの場合に該当するか現段階で確定しにくい。

1) L.M. Quattrocci and G.E. Ewing, J. Chem. Phys. **96**, 4205 (1992).

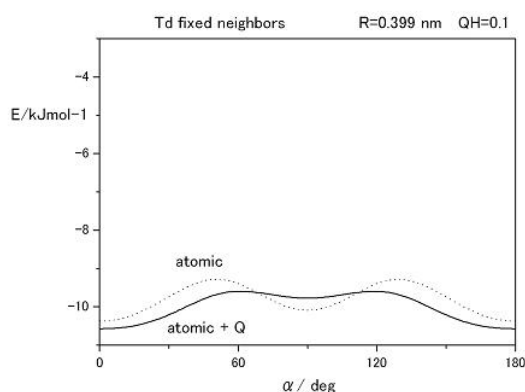


図1

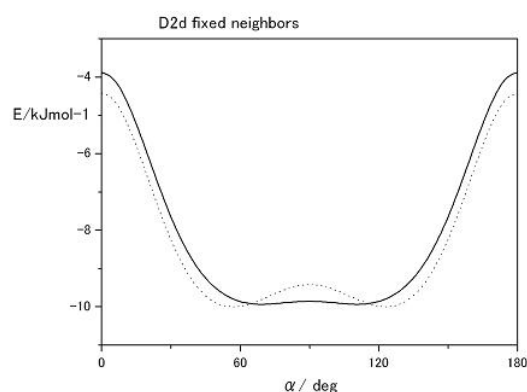


図2