

[J. Chem. Phys., 73, 697 (1980)]

**Intermolecular Vibrational Coupling in Crystalline *m*-Dinitrobenzene
—Polarized Infrared Spectra of Oriented Polycrystalline Films**

J. E. KATON*, K. HANAI, G. N. R. TRIPATHI**

m-ジニトロベンゼン結晶における分子間相互作用—配向結晶の偏光赤外スペクトル

J. E. KATON*, 花井一彦, G. N. R. TRIPATHI**

m-ジニトロベンゼン配向結晶の20 Kにおける偏光赤外スペクトルを測定し、明瞭な factor group splitting を観測することができた。このスペクトルには factor group の2成分のみが観測されることおよび oriented gas model にもとづいた相対強度の近似計算の結果と実測値の比較から、試料は窓板に平行な面として(100)面を持つことがわかった。このことは Hayashi および Bobrov らのスペクトルと比較することによって確かめられた。この配向試料では結晶モードとして A_1 振動と B_2 振動が観測される。室温におけるスペクトルの二色性と低温におけるそれとは互によく似ているが、CN 伸縮振動に帰属される 1149 cm^{-1} 吸収帯については二色比が測定誤差以上に変化する。これはおそらく低温では結晶の単位格子が収縮して分子間相互作用が増加するため、ベンゼン面から $-\text{NO}_2$ 基がさらに回転し、それによって CN 結合の性質が変化することによるものと考えられる。

ニトロベンゼン類の NO_2 変角振動については種々の帰属が報告されているが、本報では赤外二色性を考慮し、また Kuwae らのニトロベンゼンに対する基準振動計算結果を参考にして帰属を行なった。ベンゼン環の振動に関しては測定された二色性は Green らの帰属と大体対応する。

* Department of Chemistry, Miami University.

** Radiation Laboratory, University of Notre Dame.