

**Numerische Werte einiger Störsummen
zur Analyse der Torsionsfeinstruktur
von Rotationsspektren**

Von HELMUT DREIZLER, HANS-GÜNTHER SCHIRDEWAHN
und BARBARA STARCK

Institut für Physikalische Chemie der Universität
Freiburg i. Br.

(Z. Naturforsch. **18 a**, 670—671 [1963]; eingegangen am 22. März 1963)

Zur Ergänzung einer früheren Veröffentlichung¹
über die Torsionsfeinstruktur von Rotationsspektren

infolge innerer behinderter Rotation, berechneten wir
dort gegebene Störsummen für den Torsionsgrundzu-
stand, deren numerische Werte in den Tabellen von
HERSCHBACH² und PIERCE und HAYASHI³ nicht aufgeführt

1. H. DREIZLER u. H. D. RUDOLPH, Z. Naturforschg. **17 a**, 712 [1962].

2. D. R. HERSCHBACH, Tables of the Internal Rotation Problem, Dept. of Chemistry, Harvard University, Cambridge, Mass., 1957.

3. L. PIERCE u. M. HAYASHI, Tables of the Internal Rotation Problem, Dept. of Chemistry, Notre Dame University, Notre Dame, Ind., 1961.

s	$\left(\frac{p_i p_i}{\Delta_i^3} \right)_A$	$\left(\frac{p_i p_i}{\Delta_i^3} \right)_E$	$\left(\frac{p_i p_i p_i}{\Delta_i \Delta_i^2} \right)_E$	$\left(\frac{(p_i p_i) (p_j p_j)}{\Delta_i (\Delta_i + \Delta_j) \Delta_j} \right)_A$	$\left(\frac{(p_i p_i) (p_j p_j)}{\Delta_i (\Delta_i + \Delta_j) \Delta_j} \right)_E$
	$A_1 A_1$	$A_1 E, E A_1$	$A_1 E, E A_1$	$A_1 A_1$	$A_1 E, E A_1$
16	-1,077574/-2	-1,281401/-2	3,297618/-3	-2,018422/-2	-2,470683/-2
20	-8,775658/-3	-9,526239/-3	1,358834/-3	-1,901640/-2	-2,090769/-2
24	-7,293505/-3	-7,598260/-3	6,090218/-4	-1,766830/-2	-1,851769/-2
28	-6,194053/-3	-6,327428/-3	2,904373/-4	-1,642888/-2	-1,683306/-2
32	-5,361556/-3	-5,423508/-3	1,454267/-4	-1,535371/-2	-1,555539/-2
36	-4,715795/-3	-4,746004/-3	7,577383/-5	-1,443337/-2	-1,453808/-2
40	-4,203225/-3	-4,218566/-3	4,082460/-5	-1,364401/-2	-1,370023/-2
44	-3,787928/-3	-3,795992/-3	2,263528/-5	-1,296197/-2	-1,299305/-2
48	-3,445353/-3	-3,449721/-3	1,286637/-5	-1,236736/-2	-1,238498/-2
52	-3,158335/-3	-3,160762/-3	7,476510/-6	-1,184422/-2	-1,185442/-2
56	-2,914599/-3	-2,915980/-3	4,430168/-6	-1,137998/-2	-1,138603/-2
60	-2,705175/-3	-2,705977/-3	2,671706/-6	-1,096479/-2	-1,096843/-2
64	-2,523379/-3	-2,523852/-3	1,636933/-6	-1,059081/-2	-1,059303/-2
68	-2,364134/-3	-2,364420/-3	1,017743/-6	-1,025178/-2	-1,025316/-2
72	-2,223528/-3	-2,223702/-3	6,412278/-7	-9,942689/-3	-9,943559/-3
76	-2,098493/-3	-2,098601/-3	4,095634/-7	-9,659427/-3	-9,659978/-3
80	-1,986598/-3	-1,986666/-3	2,637352/-7	-9,398633/-3	-9,398990/-3
84	-1,885889/-3	-1,885932/-3	1,724045/-7	-9,157517/-3	-9,157749/-3
88	-1,794778/-3	-1,794805/-3	1,131716/-7	-8,933743/-3	-8,933896/-3
92	-1,711964/-3	-1,711982/-3	7,520969/-8	-8,725347/-3	-8,725448/-3
96	-1,636369/-3	-1,636381/-3	5,048281/-8	-8,530655/-3	-8,530723/-3
100	-1,567094/-3	-1,567102/-3	3,405085/-8	-8,348244/-3	-8,348288/-3
s	$\left(\frac{(p_i p_i) (p_j p_j)}{\Delta_i^2 (\Delta_i + \Delta_j)} \right)_A$	$\left(\frac{(p_i p_i) (p_j p_j)}{\Delta_i^2 (\Delta_i + \Delta_j)} \right)_E$	$\frac{(p_i p_i) A (p_j p_j) E}{\Delta_i A (\Delta_i A + \Delta_j E) \Delta_j E}$	$\frac{(p_i p_i) A (p_j p_j) E}{\Delta_i^2 A (\Delta_i A + \Delta_j E)}$	$\frac{(p_i p_i) A (p_j p_j) E}{(\Delta_i A + \Delta_j E) \Delta_j^2 E}$
	$A_1 A_1$	$A_1 E, E A_1$	$E E$	$E E$	$E E$
16	-2,021381/-2	-2,483308/-2	-2,232536/-2	-2,140592/-2	-2,344396/-2
20	-1,904381/-2	-2,097665/-2	-1,993841/-2	-1,955489/-2	-2,042701/-2
24	-1,769195/-2	-1,856045/-2	-1,808773/-2	-1,792304/-2	-1,832079/-2
28	-1,644876/-2	-1,686221/-2	-1,662967/-2	-1,655872/-2	-1,675014/-2
32	-1,537032/-2	-1,557671/-2	-1,545421/-2	-1,542505/-2	-1,552142/-2
36	-1,444731/-2	-1,455449/-2	-1,448563/-2	-1,447562/-2	-1,452601/-2
40	-1,365579/-2	-1,371336/-2	-1,367209/-2	-1,367094/-2	-1,369816/-2
44	-1,297203/-2	-1,300386/-2	-1,297750/-2	-1,298038/-2	-1,299550/-2
48	-1,237603/-2	-1,239408/-2	-1,237616/-2	-1,238075/-2	-1,238936/-2
52	-1,185177/-2	-1,186223/-2	-1,184932/-2	-1,185449/-2	-1,185950/-2
56	-1,138662/-2	-1,139281/-2	-1,138301/-2	-1,138823/-2	-1,139120/-2
60	-1,097067/-2	-1,097440/-2	-1,096661/-2	-1,097164/-2	-1,097343/-2
64	-1,059606/-2	-1,059833/-2	-1,059192/-2	-1,059665/-2	-1,059775/-2
68	-1,025650/-2	-1,025792/-2	-1,025247/-2	-1,025687/-2	-1,025755/-2
72	-9,946958/-3	-9,947851/-3	-9,943124/-3	-9,947188/-3	-9,947620/-3
76	-9,663310/-3	-9,663876/-3	-9,659702/-3	-9,663455/-3	-9,663731/-3
80	-9,402184/-3	-9,402550/-3	-9,398812/-3	-9,402278/-3	-9,402456/-3
84	-9,160779/-3	-9,161017/-3	-9,157633/-3	-9,160840/-3	-9,160956/-3
88	-8,936752/-3	-8,936909/-3	-8,933819/-3	-8,936792/-3	-8,936869/-3
92	-8,728134/-3	-8,728237/-3	-8,725398/-3	-8,728160/-3	-8,728211/-3
96	-8,533244/-3	-8,533314/-3	-8,530689/-3	-8,533262/-3	-8,533296/-3
100	-8,350658/-3	-8,350703/-3	-8,348266/-3	-8,350669/-3	-8,350691/-3

Tab. 1.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

sind. Wir verwendeten aber die Matrixelemente $p_{vv'}$ und die Eigenwerte $b_{v\sigma}$, die in diesen Tabellen angegeben werden, zur Bildung der Summen. Sie folgen aus einer Störungsrechnung vierter Ordnung bei Molekülen

$$\frac{(p_i p_i) (p_j p_j)}{\Delta_i (\Delta_i + \Delta_j) \Delta_j} = \sum'_{v_i} \sum'_{v_j} \frac{(v_i \sigma_i | p_i | v_i' \sigma_i) (v_i' \sigma_i | p_i | v_i \sigma_i) (v_j \sigma_j | p_j | v_j' \sigma_j) (v_j' \sigma_j | p_j | v_j \sigma_j)}{(b_{v_i \sigma_i} - b_{v_i' \sigma_i}) (b_{v_i \sigma_i} - b_{v_i' \sigma_i} + b_{v_j \sigma_j} - b_{v_j' \sigma_j}) (b_{v_j \sigma_j} - b_{v_j' \sigma_j})}.$$

(In dieser Tabelle: $v_i = v_j = 0$.)

Es gilt noch: $(p_i p_i) (p_j p_j) / (\Delta_i^2 (\Delta_i + \Delta_j)) = (p_i p_i) (p_j p_j) / ((\Delta_i + \Delta_j) \Delta_j^2)$, falls alle Teile der Summe einer einheitlichen Spezies A oder E zugehören.

Die zweite Zeile der Tabelle gibt an, welches Niveau – angegeben durch die zugeordnete Speziesbezeich-

nung mit zwei symmetrischen Teilkreisen und müssen in entsprechend gelegenen Fällen zur Bestimmung der Torsionsfeinstruktur hinzugezogen werden. Die Bezeichnungsweise entspricht der früher¹ benutzten. So ist z. B.

nung – durch die Störsumme der betreffenden Spalte beeinflußt wird.

Die Rechnungen wurden mit einer elektronischen Rechenanlage Z 22 in einer neunstelligen Gleitkommaarithmetik ohne Rundung ausgeführt. Die Schreibweise der Zahlen ist halblogarithmisch.

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft, die uns die Arbeiten auf diesem Gebiet ermöglichte.

Untersuchung der Lebensdauer angeregter Kernniveaus von Ca⁴²

Von D. BLOESS und F. MÜNNICH

Physikalisches Institut der Technischen Hochschule
Braunschweig

(Z. Naturforsch. **18 a**, 671–672 [1963]; eingegangen am 3. April 1963)

Kerne in der Nähe doppelt abgeschlossener Schalen sind theoretisch von besonderem Interesse, weil bei ihnen das Schalenmodell in seiner erweiterten Form einen guten Ausgangspunkt liefert für die Berechnung der Kerneigenschaften. Außerdem ist es möglich, je nach der Anzahl der Nukleonen in der nicht abgeschlossenen Schale, den Einfluß anderer Kernmodellvorstellungen, z. B. kollektiver Anregungen, mit Voraussagen des Schalenmodells in Verbindung zu bringen. Dies gilt vor allem für die Isotope des Ca, bei denen nach dem einfachen Schalenmodell $f_{7/2}$ -Neutronen miteinander gekoppelt sind, während die 20 Protonen eine stabile Konfiguration bilden. Aus diesem Grunde wurden über diese Isotope verschiedene theoretische Untersuchungen durchgeführt (Literaturangaben bei McCULLEN und KRAUSHAAR¹). Für die theoretische Behandlung der Kerneigenschaften ist es jedoch wichtig, daß genügend genaues experimentelles Material über die betreffenden Kerne vorliegt. Nun wurde von SIMMS et al.² die Lebensdauer des zweiten angeregten Niveaus von Ca⁴² gemessen; vgl. Niveauschema nach Abb. 1. Dieser Übergang ist auch aus anderen Gründen theoretisch interessant, da es sich hier um einen 0^+ -Zustand handelt; elektrische Monopolübergänge liefern bekanntlich eine Aussage über die Kernstruktur.

Die Messung der Lebensdauer dieses Zustands ist schwierig; jedenfalls dann, wenn man eine hinreichende Meßgenauigkeit erreichen möchte. SIMMS et al. konnten jedoch mit Hilfe einer sehr eleganten Methode, die die

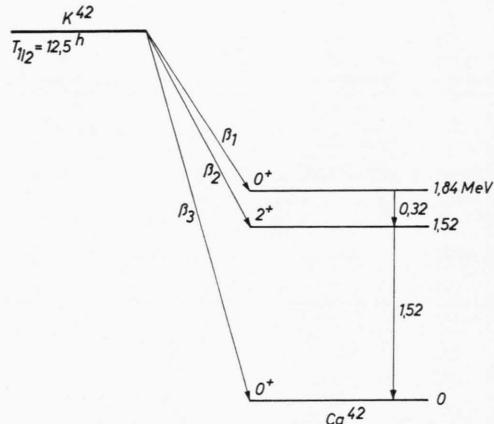


Abb. 1. Vereinfachtes Zerfallsschema von K⁴² (nach Nuclear Data Sheets, NRC 60-6-3). β_1 : 1,71 MeV; 0,18%; β_2 : 2,03 MeV; 17,7%; β_3 : 3,55 MeV; 82%.

üblichen Fehlerquellen, wie sie bei solchen Messungen auftreten, stark reduzieren, die Halbwertszeit dieses Zustands bestimmen. Der von ihnen gemessene Wert beträgt $T_{1/2} = (3,3 \pm 0,3) \cdot 10^{-10}$ sec. Voraussetzung für die Messung war jedoch, daß die Lebensdauer des ersten angeregten Niveaus bei 1,52 MeV sehr viel kleiner ist als die des zweiten angeregten Niveaus; im Prinzip wurde nämlich nach dem gewählten Meßverfahren eigentlich die Differenz beider Lebensdauern bestimmt. Da aus theoretischen Gründen zu erwarten ist, daß die Lebensdauer des ersten Niveaus etwa 10^{-13} sec beträgt, war diese Voraussetzung als erfüllt anzusehen.

Im Widerspruch dazu wurde jedoch von PANCHOLI und SAHA³ die Halbwertszeit des ersten angeregten Niveaus bei 1,52 MeV experimentell zu $T_{1/2} = (1,0 \pm 0,4) \cdot 10^{-9}$ sec gemessen, und zwar mit einer neu ent-

¹ J. D. McCULLEN u. J. J. KRAUSHAAR, Phys. Rev. **122**, 555 [1961].

² P. C. SIMMS, N. BENCZER-KOLLER u. C. S. WU, Phys. Rev. **121**, 1169 [1961].

³ S. C. PANCHOLI u. N.K.SAHA, Nucl. Instrum. **14**, 189 [1962].