

ten Verfahren vorzuziehen wäre. Eine Anpassung der niedrigsten 8 Linien ( $J \leq 2$ ) des Meßmaterials <sup>2</sup> an das Spektrum eines starren Kreisels gelingt allerdings nur mit dem beträchtlichen mittleren Frequenzfehler von 350 kHz, s. Tab. 2. Es wäre auch sicher nicht richtig, aus diesem Frequenzfehler (der weit überwiegend kein statistischer ist, sondern auf der Unzulänglichkeit des

$\frac{1}{2}(A+C) = 11\,763,517\text{ MHz},$
$\frac{1}{2}(A-C) = 6\,045,759\text{ MHz},$
$\kappa = -0,685\,189.$

Tab. 2. Rotationskonstanten des  $(\text{CH}_3)_2\text{S}$  aus der Anpassung von 8 Linien,  $J \leq 2$ , an das Spektrum eines starren Kreisels. Der mittlere Frequenzfehler der Anpassung betrug  $\sigma = 350\text{ kHz}$ .

starrten Modells beruht) wie oben nach ZURMÜHL <sup>5</sup> die Bestimmungsfehler der Rotationskonstanten berechnen zu wollen (man erhalte  $\pm 50\text{ kHz}$  für  $(A+C)/2$  und  $(A-C)/2$  und  $\pm 2 \cdot 10^{-5}$  für  $\kappa$ ). Die wirklichen Be-

stimmungsfehler auf Grund des unzureichenden Modells sind sicher erheblich größer. Will man die Rotationskonstanten genauer bestimmen, so bleibt man auf die Benutzung des zentrifugalverzerrten Modells angewiesen, was dann aber die Analyse eines ausreichend großen Meßmaterials (hier vermutlich rd. 100 Linien) notwendig macht, damit die 9 Konstanten trotz der Meßfehler ausreichend genau bestimmt und trotz der Rundungsfehler ausreichend genau aus der Analyse entnommen werden können.

Unsere Ausführungen bestätigen erneut die Erfahrung, daß eine Analyse der Zentrifugalaufweitung nur mit großer Vorsicht unter Abschätzung aller Fehler, des rechnerischen Rundungs- und des experimentellen Meßfehlers, durchgeführt werden sollte. *Eine gute Übereinstimmung der gemessenen und gerechneten Spektren ist allein noch kein Beweis für die Güte der gewonnenen Konstanten.*

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft, die unsere Arbeit unterstützt hat, und dem Rechenzentrum der Universität Freiburg.

### Das Bandenspektrum des RhC

A. LAGERQVIST, H. NEUHAUS und R. SCULLMAN

Physikalisches Institut der Universität Stockholm, Schweden  
(Z. Naturforsch. **20 a**, 751–752 [1965]; eingegangen am 29. April 1965)

In experimenteller Hinsicht schließt sich diese Arbeit unmittelbar an die vorausgegangenen Mitteilungen <sup>1–3</sup> an. Sie befaßt sich mit der Analyse des Rhodiumcarbids (RhC). Die Untersuchung wurde im Rahmen von Arbeiten über die Carbide und Hydride der Elemente der Co- und Ni-Gruppen des periodischen Systems ausgeführt <sup>1–7</sup>.

Die experimentelle Anordnung (Kings-Ofen) sowie die Ausführung des Versuches (Absorption) sind schon früher eingehend beschrieben worden <sup>1, 3</sup>. Es seien hier nur noch einige Bemerkungen allgemeinen Charakters hinzugefügt.

In der PtC-Mitteilung <sup>3</sup> wurde festgestellt, daß die Elemente Rh und Pt, welche hohe Schmelz- und Siedepunkte besitzen, Carbidspektren aufweisen; entsprechende Versuche mit den Elementen Fe, Co, Ni und Pd sind aber erfolglos geblieben. Eine Erklärung dafür, daß die Versuche mit den leichtverdampfenden Metallen scheiterten, ist vielleicht, daß infolge der hohen Temperatur (über 3400 °C) die Metalle aus dem Heizrohr sehr schnell abdestilliert werden. Die Temperatur darf aber nicht erniedrigt werden, da sonst der Dampfdruck der Kohle und der eventuell vorhandenen Carbide nicht aufrechterhalten werden kann.

<sup>1</sup> H. NEUHAUS u. R. SCULLMAN, Z. Naturforsch. **19 a**, 659 [1964].

<sup>2</sup> R. SCULLMAN, Arkiv Fysik **28**, 255 [1965].

<sup>3</sup> H. NEUHAUS, R. SCULLMAN u. B. YTTERMO, Z. Naturforsch. **20 a**, 162 [1965].

<sup>4</sup> L. KLYNNING u. H. NEUHAUS, Z. Naturforsch. **18 a**, 1142 [1963].

Zustand	$B_e$	$\omega_e$	Übergang $v'-v''$	Lage des Bandenkopfes in $\text{cm}^{-1}$
$X^2\Sigma$	0,603	1050	$B^2\Sigma - X^2\Sigma$	
$B^2\Sigma$	0,549	1004	3,0	23 998
			2,0	23 154
			1,0	22 291
			0,0	21 459
			0,1	20 420
			1,2	20 222
			$A^2\Sigma - X^2\Sigma$	
			0,0	21 291

Tab. 1

Die Frage, wie hoch die Endtemperatur des Heizrohres steigt, ist immer noch nicht mit Sicherheit beantwortet. Als untere Grenze kann mit großer Wahrscheinlichkeit der Schmelzpunkt des Wolframs angegeben werden <sup>1</sup>. Es ist aber anzunehmen, daß während der kurzen Lebensdauer des Heizrohres (30 bis 45 Sek.) die Temperatur rasch ansteigt, bis das Rohr zerbricht, und daher keinen konstanten Wert erreicht.

Im Falle des PtC-Spektrums <sup>3</sup> konnte das Molekül mit Hilfe des Isotopieeffekts identifiziert werden. Da Rhodium nur ein Isotop hat, muß das Spektrum dem Rhodiumcarbid aus folgenden anderen Gründen zugeschrieben werden.

Das Spektrum tritt sowohl bei Wasserstoff wie bei Deuterium auf, was ein Hydridspektrum ausschließt. Das Auftreten von starken Rh-Linien weist darauf hin, daß

<sup>5</sup> E. ANDERSÉN, A. LAGERQVIST, H. NEUHAUS u. N. ÅSLUND, Proc. Phys. Soc., Lond. **82**, 637 [1963].

<sup>6</sup> A. LAGERQVIST, H. NEUHAUS u. R. SCULLMAN, Proc. Phys. Soc., Lond. **83**, 498 [1964].

<sup>7</sup> N. ÅSLUND, H. NEUHAUS, A. LAGERQVIST u. E. ANDERSÉN, Arkiv Fysik **28**, 271 [1965].



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 digitalized 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.

der Rhodiumdampf im Ofen vorhanden war. Am meisten deutet auf RhC jedoch, daß die experimentellen Bedingungen genau dieselben waren wie bei der Erzeugung von PtC, und daß die Schmelz- und Siedepunkte von Rh und Pt fast übereinstimmen. Der Reinheitsgrad des verwendeten Rh-Metalles war etwa 99%. Schließlich sind die berechneten Molekülkonstanten im Vergleich mit den Konstanten von PtC von derselben Größenordnung.

Die Banden, sämtliche nach Rot abgeschattiert, können in zwei Systeme,  $A^2\Sigma-X^2\Sigma$  und  $B^2\Sigma-X^2\Sigma$  eingeordnet werden. Die Bandenkonstanten sind in Tab. 1 angegeben. Die oberen Zustände A und B stören einander stark. Auch andere Elektronenzustände verursachen kleinere Störungen.

Eine ausführliche Mitteilung über RhC ist in Vorbereitung und wird voraussichtlich im Arkiv för Fysik veröffentlicht.