

NOTIZEN

Spingewichte in den Torsions-Rotationsspektren von Molekülen des Typs Wasserstoffperoxid

H. DREIZLER

Physikalisches Institut der Universität Freiburg i. Br. *
(Z. Naturforsch. **22 a**, 828 [1967]; eingegangen am 3. April 1967)

In Ergänzung zu einer früheren Arbeit¹, in der die Invarianzgruppe des Torsions-Rotationsoperators² für Moleküle vom Typ des H_2O_2 angegeben wurde, gebe ich in dieser Notiz die statistischen Spingewichte. Sie sind für die praktische Spektroskopie von großem Nutzen.

Die Invarianzgruppe ist \bar{V} : (E), (C_{2x}) , $(C_{2x} \cdot T)$, (T).

Die Definition der Elemente von \bar{V} wurde in¹ gegeben. Die Spinaustauschgruppe ist C_2 : (E), (C_{2x}) , da nur C_{2x} : $\Theta \rightarrow \pi - \Theta$, $\Phi \rightarrow \pi - \Phi$, $\psi \rightarrow \pi + \psi$, $\eta \rightarrow \eta$ (vgl. Abb. 2 aus¹) Kerne austauscht. Die Korrelation zwischen den Spezies der Gruppen \bar{V} und C_2 ist einfach anzugeben:

$$\frac{\bar{A}_1}{A_2} > A \quad \frac{\bar{B}_2}{B_1} > B.$$

Die Spezies A und B von C_2 wurden entsprechend der Charaktertafel gewählt:

C_2	E	C_{2x}
A	1	1
B	1	-1

* z. Zt. Laboratorio di Spettroscopica a Radiofrequenza del C.N.R. Istituto Chimico „G. CIAMICIAN“, Università degli Studi di Bologna.

¹ H. DREIZLER, Z. Naturforsch. **21 a**, 1628 [1966].

Bezeichnet man den Spin I der Kerne entsprechend Abb. 1 aus¹ mit den Indizes m_1 und m_2 , so ist die Anzahl der Spinfunktionen

$$(2I_{m_1} + 1)^2 \cdot (2I_{m_2} + 1)^2.$$

Nach Reduktion der Basis, die die Spinfunktionen für C_2 bilden, erhält man

$$\frac{1}{2} (2I_{m_1} + 1) (2I_{m_2} + 1) \cdot \{ (2I_{m_1} + 1) (2I_{m_2} + 1) \pm 1 \}.$$

Spinfunktionen der Spezies A (+-Zeichen) und B (-Zeichen). Je nach dem Spin der Kerne m_1 und m_2 müssen die Gesamteigenfunktionen symmetrisch (Spezies A) oder antisymmetrisch (Spezies B) sein. Beim H_2O_2 müssen sie der Spezies B angehören. Demnach sind die Gewichte der Torsions-Rotationszustände

$$g(\bar{A}_1, \bar{A}_2) : g(\bar{B}_1, \bar{B}_2) = 1 : 3.$$

In¹ war erwähnt worden, daß die Symmetriebetrachtungen auch für solche Moleküle zutreffen, die zwei gleiche tordierende Molekülteile besitzen. Jedes dieser Teile muß eine Symmetrieebene besitzen, welche die Torsionsachse enthält. H_2O_2 ist der einfachste Fall eines solchen Moleküls. $\text{CH}_2\text{F}-\text{CH}_2\text{F}$ fällt ebenfalls in diese Klasse. Besteht jeder dieser gleichen Molekülteile aus n Atomen, so gibt es in Verallgemeinerung obiger Angaben $\frac{1}{2} \prod_i^n (2I_i + 1) \{ \prod_i^n (2I_i + 1) \pm 1 \}$ Spinfunktionen der Spezies A (+-Zeichen) und B (-Zeichen).

Herrn Prof. Dr. P. FAVERO danke ich für die gastliche Aufnahme in seinem Laboratorium.

² R. H. HUNT, R. A. LEACOCK, C. W. PETERS u. K. T. HECHT, J. Chem. Phys. **42**, 1931 [1965]. — R. A. LEACOCK, Dissertation, Univ. of Michigan 1963.

Suszeptibilitätsmessungen an DyAlO_3 und HoFeO_3

I. GRAMBOW, P. KRONAUER, J. SCHNEIDER und H. SCHUCHERT

Institut für Technische Physik, Techn. Hochschule Darmstadt

(Z. Naturforsch. **22 a**, 828—830 [1967]; eingegangen am 1. April 1967)

Die magnetischen Eigenschaften der Perowskite RBO_3 (R = Selten-Erd-Ion, B = 3d-Ion oder Aluminium) sind von besonderem Interesse, weil diese Substanzen im Vergleich zu den Spinellferriten oder Granaten eine re-

lativ einfache Kristallstruktur haben^{1, 2}. In allen bisher bekannten Perowskiten der genannten Form tritt kollektiver Magnetismus im Untergitter der Selten-Erd-Ionen erst unterhalb von 20 °K auf.

Im folgenden wird über Suszeptibilitätsmessungen an Dysprosiumaluminiumperowskit (DyAlO_3) und Holmiumeisenperowskit (HoFeO_3) berichtet, die das Ziel hatten, die Ordnungstemperaturen der Selten-Erd-Untergitter zu bestimmen. Die Einkristalle von DyAlO_3 wurden nach dem VERNEUILLE-Verfahren³ hergestellt, die von HoFeO_3 aus der Schmelze⁴ gezogen.

¹ Eine Zusammenfassung über die magnetischen Eigenschaften der Perowskite findet sich bei J. B. GOODENOUGH: "Magnetic Properties of Perovskites" in LANDOLT-BÖRNSTEIN, Vol. II, 9, Springer-Verlag, Berlin 1962, S. 2—187.

² D. TREVES, J. Appl. Phys. **36**, 1033 [1965].

³ R. A. LEFEVER u. G. W. CLARK, Rev. Sci. Instrum. **33**, 769 [1962].

⁴ J. W. NIELSEN, J. Appl. Phys. **29**, 390 [1958].

