

## 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 Arbeit<sup>1</sup>, in der die Invarianzgruppe des Torsions-Rotationsoperators<sup>2</sup> für Moleküle vom Typ des  $\text{H}_2\text{O}_2$  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), ( $\text{C}_{2x}$ ), ( $\text{C}_{2x} \cdot \text{T}$ ), ( $\text{T}$ ).

Die Definition der Elemente von  $\bar{V}$  wurde in<sup>1</sup> gegeben. Die Spinaustauschgruppe ist  $\text{C}_2$ : (E), ( $\text{C}_{2x}$ ), da nur  $\text{C}_{2x}$ :  $\Theta \rightarrow \pi - \Theta$ ,  $\Phi \rightarrow \pi - \Phi$ ,  $\psi \rightarrow \pi + \psi$ ,  $\eta \rightarrow \eta$  (vgl. Abb. 2 aus<sup>1</sup>) Kerne austauscht. Die Korrelation zwischen den Spezies der Gruppen  $\bar{V}$  und  $\text{C}_2$  ist einfach anzugeben:

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

Die Spezies A und B von  $\text{C}_2$  wurden entsprechend der Charaktertafel gewählt:

$\text{C}_2$	E	$\text{C}_{2x}$
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.

<sup>1</sup> H. DREIZLER, Z. Naturforsch. 21 a, 1628 [1966].

Bezeichnet man den Spin  $I$  der Kerne entsprechend Abb. 1 aus<sup>1</sup> mit den Indizes  $m_1$  und  $m_2$ , so ist die Anzahl der Spinfunktionen

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

Nach Reduktion der Basis, die die Spinfunktionen für  $\text{C}_2$  bilden, erhält man

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

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  $\text{H}_2\text{O}_2$  müssen sie der Spezies B angehören. Demnach sind die Gewichte der Torsions-Rotationszustände

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

In<sup>1</sup> 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.  $\text{H}_2\text{O}_2$  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  $\frac{1}{2} \prod_i (2 I_i + 1) \{ \prod_i (2 I_i + 1) \pm 1 \}$  Spinfunktionen der Spezies A (+-Zeichen) und B (--Zeichen).

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

<sup>2</sup> 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 $\text{DyAlO}_3$ und $\text{HoFeO}_3$

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 Perowskiten  $\text{RBO}_3$  ( $\text{R}$  = Selten-Erd-Ion,  $\text{B}$  = 3d-Ion oder Aluminium) sind von besonderem Interesse, weil diese Substanzen im Vergleich zu den Spinellferriten oder Granaten eine re-

lativ einfache Kristallstruktur haben<sup>1, 2</sup>. In allen bisher bekannten Perowskiten der genannten Form tritt kollektiver Magnetismus im Untergitter der Selten-Erd-Ionen erst unterhalb von  $20^\circ\text{K}$  auf.

Im folgenden wird über Suszeptibilitätsmessungen an Dysprosiumaluminumperowskit ( $\text{DyAlO}_3$ ) und Holmiumeisenperowskit ( $\text{HoFeO}_3$ ) berichtet, die das Ziel hatten, die Ordnungstemperaturen der Selten-Erd-Untergitter zu bestimmen. Die Einkristalle von  $\text{DyAlO}_3$  wurden nach dem VERNEUILLE-Verfahren<sup>3</sup> hergestellt, die von  $\text{HoFeO}_3$  aus der Schmelze<sup>4</sup> gezogen.

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

<sup>2</sup> D. TREVES, J. Appl. Phys. 36, 1033 [1965].

<sup>3</sup> R. A. LEFEVER u. G. W. CLARK, Rev. Sci. Instrum. 33, 769 [1962].

<sup>4</sup> J. W. NIELSEN, J. Appl. Phys. 29, 390 [1958].



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.