

im Spektrum des reinen Isonitrils überlagert sich in der nematischen Phase die direkte Dipolkopplung  $B^{14}\text{NH}$ . Die Linienabstände sind gegeben durch

$$\Delta\nu = 2 |B_{\text{NH}} + J_{\text{NH}}| = 124 \text{ Hz}.$$

Die direkte Kopplung der drei äquivalenten Protonen der Methylgruppe untereinander ist infolge des geringen Abstandes sehr stark. Sie bedingt das Triplet von Triplets mit dem Intensitätsverhältnis 1:2:1 und einem Linienabstand  $\Delta\nu = 3 |B_{\text{HH}}| = 3066 \text{ Hz}$ . Da die Konzentration des  $^{13}\text{C}$ -Isotops nur etwa 60% beträgt, wird nur ein Teil der Moleküle eine weitere Dublett-Aufspaltung aller Linien zeigen. Sie ist gleich

$$\Delta\nu = 2 |B^{14}\text{CH} + J^{14}\text{CH}| = 1656 \text{ Hz}.$$

Für eine Methylgruppe lassen sich die Ordnungsgrade für die H—H- und C—H-Verbindungslien durch den Ordnungsgrad der dreizähligen Symmetrieadse  $S_{\text{C}_3}$  ausdrücken<sup>4</sup>:

$$S_{\text{HH}} = -\frac{1}{2}S_{\text{C}_3}; \quad S_{\text{CH}} = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \beta - 1) S_{\text{C}_3}.$$

Hier bezeichnet  $\beta$  den Winkel zwischen der Symmetrieadse und der C—H-Bindung. Berücksichtigt man ferner, daß zwischen dem HCH-Bindungswinkel  $\alpha$ ,  $r_{\text{HH}}$  und  $r_{\text{CH}}$  bzw. zwischen  $\beta$  und  $\alpha$  folgende Beziehungen bestehen,

$$r_{\text{HH}} = 2 \sin(\alpha/2) r_{\text{CH}}, \\ \frac{1}{2}(3 \cos^2 \beta - 1) = 1 - 2 \sin^2(\alpha/2),$$

so ergibt sich für

$$B_{\text{CH}} = -\frac{\hbar}{4\pi^2} \frac{1}{r_{\text{CH}}^3} \gamma_{\text{H}} \gamma^{14}\text{C} S_{\text{C}_3} (1 - 2 \sin^2(\alpha/2)),$$

$$B_{\text{HH}} = \frac{\hbar}{8\pi^2} \frac{1}{r_{\text{CH}}^3} \gamma_{\text{H}}^2 S_{\text{C}_3} (2 \sin(\alpha/2)).$$

<sup>4</sup> A. SAUPE, Z. Naturforsch. **19a**, 161 [1964].

<sup>5</sup> M. KESSLER, H. RING, R. TRAMBARULO u. W. GORDY, Phys. Rev. **79**, 54 [1950].

Das Verhältnis  $B_{\text{CH}} : B_{\text{HH}}$  ist

$$\frac{B_{\text{CH}}}{B_{\text{HH}}} = 16 \frac{\gamma^{14}\text{C}}{\gamma_{\text{H}}} \sin^3(\alpha/2) (2 \sin^2(\alpha/2) - 1)$$

vom Ordnungsgrad  $S_{\text{C}_3}$  und den Abständen  $r_{\text{HH}}$  bzw.  $r_{\text{CH}}$  unabhängig. Die Bestimmung des Valenzwinkels  $\alpha$  wird auf eine Frequenzmessung zurückgeführt. Mit  $B_{\text{HC}} : B_{\text{HH}} = 0,744$  ergibt sich für  $\alpha = 109^\circ 45' \pm 3'$ ; (MW  $109^\circ 46'$ )<sup>5</sup>.

Benutzen wir in

$$\Delta\nu = 2 |B_{\text{CH}} + J_{\text{CH}}|$$

das negative Vorzeichen für  $J$ , resultiert ein unrealistischer Wert von  $112^\circ$  für  $\alpha$ . Damit ist das absolute Vorzeichen von  $J_{\text{CH}}$  im Isonitril positiv anzunehmen.

Einfache geometrische Beziehungen bestehen auch zwischen  $r_{\text{CN}}$  und  $r_{\text{CH}}$ :

$$\frac{r_{\text{CN}}}{r_{\text{CH}}} = \sin \beta_1 \frac{\cos \beta_2}{\sin \beta_2} - \cos \beta_1;$$

$\beta_2$  ist hier der Winkel zwischen der dreizähligen Achse und dem Vektor N—H. Für das Verhältnis der beiden Bindungslängen ergibt sich aus den entsprechenden  $B$ -Werten

$$\frac{r_{\text{CN}}}{r_{\text{CH}}} = \begin{cases} 1,290 & \text{mit negativer } J_{\text{NH}}, \\ 1,232 & \text{mit positiver } J_{\text{NH}}. \end{cases}$$

Aus MW-Daten erhalten wir 1,304 unter Zugrundelegung der  $r_0$ -Werte<sup>5</sup>. Benutzen wir die von COSTAIN angegebenen  $r_S$ -Werte<sup>6</sup>, so erhalten wir 1,291 für dieses Verhältnis. Spezifische zwischenmolekulare Kräfte scheinen daher nicht vorzuliegen.

<sup>6</sup> C. C. COSTAIN, J. Chem. Phys. **29**, 864 [1958].

## Energieniveaus halbmagischer Kerne \*

J. BAIER

Physikinstitut, Reaktorzentrum Seibersdorf  
der Österr. Studiengesellschaft für Atomenergie

und M. KRIECHBAUM

Institut für Theoretische Physik der Universität Graz  
(Z. Naturforsch. **23a**, 468—470 [1968]; eingegangen am 24. Januar 1968)

Die Systematik der Energieniveaus schwerer halbmagischer Kerne wird gut durch folgendes wohlbekannte Modell beschrieben<sup>1</sup>. Die im Schalenmodell zunächst vernachlässigten Restwechselwirkungen zwischen den Nukleonen werden hier durch einen kurzreichweit-

gen Paarungskraftanteil und einen langreichweiten Kraftanteil dargestellt. Ersterer wird i. allg. durch die Methode der Quasiteilchentransformation unter Verwendung des Kompensationsprinzips, letzterer z. B. durch die Tamm-Dancoff-Methode oder die "random phase approximation" der Rechnung zugänglich gemacht<sup>1, 2</sup>.

Die erwähnte Methode zur Berücksichtigung der Paarungskraft bewirkt aber das Auftreten von Teilchenzahlschwankungen im betrachteten Vierteilchenproblem. Dies wurde in den Arbeiten<sup>1, 2</sup> nicht berücksichtigt.

Wir haben nun das folgende vereinfachte Modell zur Berechnung der Struktur gerader Pb-, Sn- und Ni-Isotope (mit  $200 \leq A \leq 206$ ,  $A = 210$ ;  $112 \leq A \leq 124$ ;  $58 \leq A \leq 64$ ) verwendet.

<sup>1</sup> L. S. KISSLINGER u. R. A. SORENSEN, Rev. Mod. Phys. **35**, 853 [1963].

\* Vorläufige Ergebnisse wurden auf der Physikertagung München 1966 der DPG und ÖPG vorgetragen.

<sup>1</sup> L. S. KISSLINGER u. R. A. SORENSEN, Mat. Fys. Medd. **31**, 11 [1959].

Wir postulieren ebenso wie in <sup>1, 2</sup> eine kurzreichweite Paarungskraft konstanter Stärke zwischen den Nukleonen außerhalb der abgeschlossenen Schalen.

Um bei der Diagonalisierung dieses Anteils der Hamilton-Funktion nach der erwähnten Methode die Teilchenzahlschwankungen zu unterdrücken, verwenden wir die Methode NOGAMIS <sup>3</sup>. Verschiedene andere Verfahren, die dazu entwickelt wurden, sind praktisch wesentlich schwieriger zu handhaben <sup>4</sup>.

Nach NOGAMI hat man vom ursprünglich gegebenen Hamilton-Operator  $H$  eine geeignet zu wählende Funktion  $f(N)$  des Teilchenzahloperators  $N$  zu subtrahieren. In der Praxis wählt man  $f(N) = \lambda_1 N + \lambda_2 N^2$ . Nun transformiert man auf Quasiteilchen und bestimmt  $\lambda_1, \lambda_2$  aus der Forderung nach Konstanz der vorgegebenen Teilchenzahl und der Bedingung, daß die Energiewerte bezüglich der Teilchenzahl entartet sein sollen.

Das Quasiteilchenvakuum ist der Grundzustand gerader Kerne. Ihre angeregten Zustände werden durch Zweiquasiteilenzustände gebildet. Bei der Berechnung ihrer Energien werden nur jene Anteile in  $H' = H - \lambda_1 N - \lambda_2 N^2$  berücksichtigt, welche die Quasiteilchenzahl erhalten.

Die langreichweiten Kräfte führen wir phänomenologisch zwischen den angeregten Quasiteilchen ein und vereinfachen damit die Rechnungen bedeutend. Sie seien speziell vom Quadrupol- und Oktupoltyp. Diesen Anteil der Restwechselwirkungen diagonalisieren wir exakt im Zweiquasiteilchenraum. Als Energien des ungestörten Problems treten dabei die vorher berechneten Zweiquasiteilchenenergien auf. Wir sind dann durch Vergleich mit dem Experiment imstande, die Kopplungsstärken  $G$ ,  $x_2, x_3$  der Paarungs-, Quadrupol- und Oktupolkraft zu ermitteln. Dabei werden für jedes Isotopensystem alle drei Parameter getrennt angepaßt. Die so gefundenen Werte sind in Tab. 1 zusammengestellt.

	$G_1$ (MeV)	$x_2$ (MeV f <sup>-2</sup> )	$x_3$ (MeV f <sup>-3</sup> )
Pb <sup>210</sup>	0,0898	0,09	0,008
Pb <sup>206</sup> – Pb <sup>200</sup>	0,1265	0,103	0,155
Sn	0,1636	0,290	0,176
Ni	0,2769	1,155	0,006

Tab. 1.

Interessanterweise ergeben sich für dieses durch die spezielle Einführung der langreichweiten Kräfte vereinfachte Modell keine nennenswerten Abweichungen gegenüber früheren theoretischen Arbeiten. Die niedrigst liegenden 2<sup>+</sup>-Zustände der untersuchten Isotope stimmen gut mit dem Experiment überein (s. Abb. 1, 2, 3).

Wie zu erwarten war, bringen die Teilchenfluktuationen keine signifikanten Veränderungen der Anregungsspektren hervor <sup>4</sup>. Wohl aber verändern sich die Grund-

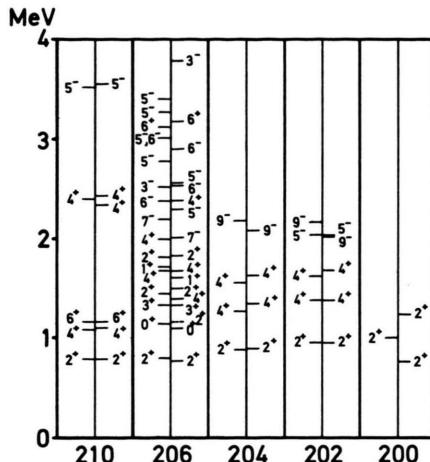


Abb. 1. Bleiisotope. Links die experimentellen Niveaus, rechts die theoretischen Resultate. Der gestrichelte 2<sup>+</sup>-Zustand ist der von KS gefundene <sup>1</sup>.

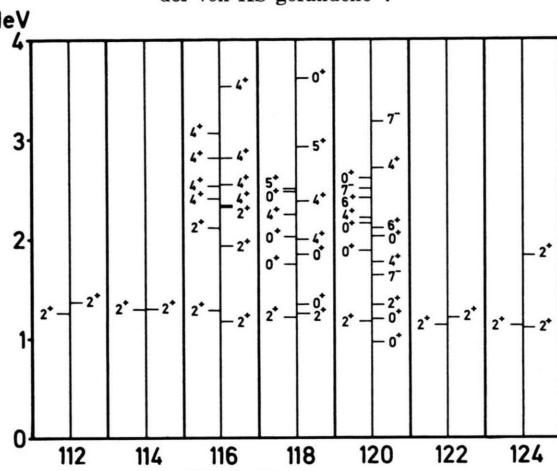


Abb. 2. Zinnisotope.

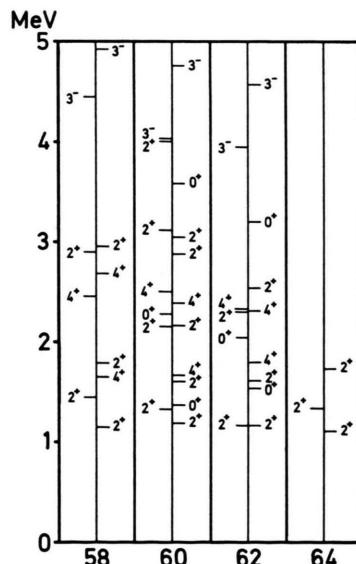


Abb. 3. Nickelisotope.

<sup>3</sup> Y. NOGAMI, Phys. Rev. **134**, 313 [1964].

<sup>4</sup> Y. NOGAMI u. I. J. ZUCKER, N. P. **60**, 203 [1964].

zustandsenergien der verschiedenen Nuklide beträchtlich. Für den Fall der Nickel-Isotope wurde dies von NOGAMI und ZUCKER<sup>4</sup> im Rahmen des Paarungskraftmodells bereits gezeigt. Wir verzichten hier darauf, detaillierte Tabellen der Grundzustandsenergien, die wir erhalten haben, hinzuzufügen, da sie für einen di-

<sup>5</sup> M. KRIECHBAUM, Acta Phys. Austriaca, in press.

rekten Vergleich mit dem Experiment ungeeignet sind.

Eine eingehende Darstellung der für die Pb-Isotope erhaltenen Resultate wird in Kürze erscheinen<sup>5</sup>.

Wir danken Herrn Prof. Dr. P. WEINZIERL für wertvolle Hinweise. Einer von uns (M. KRIECHBAUM) dankt der Österreichischen Studiengesellschaft für Atomenergie für ein Stipendium.

## Anregung hoher Rotationsniveaus von C<sub>2</sub>-Banden

G. MESSERL

DVL-Institut für Raketentreibstoffe, Abtlg. Spektroskopie,  
Stuttgart

(Z. Naturforsch. 23 a, 470 [1968]; eingegangen am 18. Januar 1968)

In einer früheren Arbeit<sup>1</sup> wurde ein Kohlebogen beschrieben, in dem einige DESLANDRES-D'AZAMBUJA-Banden ( $c^1\Pi_g - b^1\Pi_u$ ) des C<sub>2</sub>-Moleküls bis zu so hohen Rotationsquantenzahlen angeregt werden konnten, daß eine Dissoziation des  $c^1\Pi_g$ -Terms durch Rotation zu beobachten war. Diese Lichtquelle wurde weiterverwendet, um auch andere Bandensysteme des C<sub>2</sub>-Moleküls zu untersuchen.

### 1. Das Mulliken-System

Um zu entscheiden, ob im oberen Zustand des Mulliken-Systems<sup>2</sup> ( $d^1\Sigma_u^+ - x^1\Sigma_g^+$ ) evtl. eine Prädissoziation vorliege, wurde die Sequenz  $\Delta v = 0$  ( $\lambda \approx 2300 \text{ \AA}$ ) in dritter Ordnung eines 5m-Ebert-Spektrographen bei einer Dispersion von  $0,5 \text{ \AA/mm}$  auf Ilford Q2-Platten photographiert. Die Belichtungszeit betrug etwa 1 Std. Zur Unterdrückung der zweiten Ordnung war vor dem Spalt des Spektrographen eine Quarzküvette angebracht, die mit gasförmigem Chlor gefüllt war. Der Bogen brannte in Helium oder Argon bei einem Druck von etwa 20 Torr. Die Stromstärke betrug 13 A.

Die Intensität reichte aus, daß die (0-0)- und die (1-1)-Banden bis  $J=92$  und die (2-2)-Bande bis  $J=60$  analysiert werden konnten. Die eigene Zuordnung der Linien stimmt mit den Rotationsanalysen von LANDSVERK<sup>3</sup> im wesentlichen überein. Da die eigenen

Analysen ausführlicher sind, konnten die Rotationskonstanten des  $d^1\Sigma_u^+$ -Terms genauer bestimmt werden. Sie sind mit den Nullstellen der analysierten Banden in Tab. 1 zusammengestellt.

Da die Banden frei von Rotationsstörungen sind und das letzte beobachtete Rotationsniveau F<sub>93</sub> im Schwingungsniveau  $v=1$  des  $d^1\Sigma_u^+$ -Zustands schon  $10935 \text{ cm}^{-1}$  über der Dissoziationsgrenze des C<sub>2</sub>-Moleküls von  $49300 \text{ cm}^{-1}$  liegt<sup>1</sup>, ist eine Prädissoziation des  $d^1\Sigma_u^+$ -Terms in C(<sup>3</sup>P) + C(<sup>3</sup>P) ausgeschlossen. Wahrscheinlich dissoziert der  $d^1\Sigma_u^+$ -Zustand in C(<sup>1</sup>D) + C(<sup>1</sup>S), wie es die Wigner-Witmerschen Regeln<sup>3,4</sup> fordern.

### 2. Das Fox-Herzberg-System

Neben dem  $c^1\Pi_g$ -Zustand scheint sich besonders der  $B^3\Pi_g$ -Term wegen seiner flachen Potentialkurve zur Beobachtung einer Dissoziation durch Rotation zu eignen. Deshalb wurde versucht, die Fox-Herzberg-Banden<sup>5,6</sup> ( $B^3\Pi_g - X^3\Pi_u$ ) im Bogen anzuregen. Leider zeigte sich, daß unter den Bedingungen, die zur Anregung der Swan-Banden, der Deslandres-D'Azambuja-Banden und der Mulliken-Banden geeignet sind, die Fox-Herzberg-Banden nicht erscheinen. Das stimmt mit HERZBERGS Mitteilung<sup>7</sup> überein, daß er dieses Bandensystem bisher nur in Entladungen, aber nicht im Bogen beobachtet hat.

Es wurden Versuche unternommen, anstatt den Bogen in Edelgasen (He, A) zu brennen, kohlenstoffhaltige Gase zuzusetzen. Dabei ergab sich, daß die Fox-Herzberg-Banden im Bogen bei einem Zusatz von etwa 20 Torr reinem CO intensiv angeregt werden. Die (0-4)-Bande ( $\lambda_K = 2987 \text{ \AA}$ ) wurde in zweiter Ordnung bei einer Dispersion von  $0,75 \text{ \AA/mm}$  auf Kodak S-Platten photographiert. Die Belichtungszeit betrug etwa 15 Minuten.

Die Fox-Herzberg-Banden sind bei dieser Anregung im Bogen durch andere Banden stärker überlagert als bei einer Anregung in einer Glimmentladung. Dadurch wird die Rotationsanalyse erschwert. Inzwischen wurde die (0-4)-Bande bis  $J \approx 65$  analysiert. Die letzten zugeordneten Linien treten noch mit großer Intensität auf. Ob die Rotationsanalyse jedoch bis zum Abbrechen der Rotation durch Dissoziation fortgesetzt werden kann, läßt sich noch nicht entscheiden.

$v'$	$v''$	$\nu_0$	$B'$	$D' \cdot 10^6$
0 - 0		43226,74	1,8233	7,34
1 - 1		43200,97	1,8040	7,38
2 - 2		43175,56	1,7842	7,40

Tab. 1. Nullstellen der Mulliken-Banden und Rotationskonstanten des  $d^1\Sigma_u^+$ -Terms in  $\text{cm}^{-1}$ .

<sup>1</sup> G. MESSERL u. L. KRAUSS, Z. Naturforsch. 22 a, 2023 [1967].

<sup>2</sup> O. G. LANDSVERK, Phys. Rev. 56, 769 [1939].

<sup>3</sup> G. HERZBERG, Spectra of Diatomic Molecules, D. Van Nostrand Co., Inc., Princeton (N.J.) 1950.

<sup>4</sup> E. A. BALLIK u. D. A. RAMSAY, Astrophys. J. 137, 84 [1963].

<sup>5</sup> J. G. FOX u. G. HERZBERG, Phys. Rev. 52, 638 [1937].

<sup>6</sup> J. G. PHILLIPS, Astrophys. J. 110, 73 [1949].

<sup>7</sup> G. HERZBERG, persönliche Mitteilung 1967.