

# Das Mikrowellenrotationsspektrum des SnTe

J. HOEFT und E. TIEMANN

II. Physikalisches Institut der Freien Universität Berlin

(Z. Naturforsch. **23 a**, 1034—1039 [1968]; eingegangen am 10. April 1968)

Im Frequenzbereich 12–19 GHz wurden bei Temperaturen um 650 °C Rotationsübergänge von 27 isotopen Molekeln des SnTe gemessen. Es werden Rotationskonstanten, Kernabstände, Koeffizienten der Potentialfunktionen nach DUNHAM und MORSE sowie Massenverhältnisse von Zinn- und Tellurisotopen mitgeteilt. Als Mittelwert für den Gleichgewichtsabstand der Kerne ergibt sich  $r_e = (2,522\,804 \pm 0,000\,029) \text{ \AA}$ .

Mit der Messung des reinen Rotationsspektrums des SnTe wurde die systematische Untersuchung zweiatomiger (IV/VI)-Verbindungen fortgesetzt. In dieser Molekelklasse sind mit unserer experimentellen Anordnung (100 kHz-Stark-Effekt-Spektrometer, heizbare Absorptionszelle) bisher Rotationsübergänge von Sulfiden<sup>1</sup>, Seleniden<sup>2,3</sup> und GeTe<sup>4</sup> beobachtet worden. Als Substanz diente 99-proz. SnTe<sup>5</sup> mit natürlicher Isotopenverteilung. Im Frequenzbereich 12–19 GHz wurden 155 Linien der Rotationsübergänge  $J=4 \rightarrow 5$ ,  $5 \rightarrow 6$  und  $6 \rightarrow 7$  gemessen, die entsprechend Tab. 1 eindeutig 27 isotopen Molekeln mit Häufigkeiten zwischen 0,8 und 11,3% zugeordnet werden konnten. Linien des Übergangs  $J=7 \rightarrow 8$  wurden beobachtet aber nicht ausgewertet, da die verfügbare Feldstärke für eine vollständige Stark-Aufspaltung nicht ausreichte. Die Schwingungsfeinstruktur der Rotationsübergänge konnte bis zum Zustand  $v=6$  verfolgt werden. Die Linien wurden bei Temperaturen um 650 °C eingemessen. Als volle Halbwertsbreiten ergaben sich Werte um 400 kHz.

Für die Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung des schwingenden Rotators in der Born-Oppenheimer-Näherung benutzte DUNHAM<sup>6</sup> den Potentialansatz

$$V(\xi) = a_0 \xi^2 \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \xi^n\right) \quad (1)$$

mit  $\xi = (r - r_e)/r_e$  und

$$a_0 = 2 \pi^2 \omega_e^2 \mu r_e^2. \quad (1')$$

Hierin bedeuten  $\omega_e$  die Schwingungskonstante des harmonischen Oszillators,  $\mu$  die reduzierte Masse

der Molekel und  $r_e$  der Gleichgewichtsabstand der Kerne. Bei der Separation der Schrödinger-Gleichung in Winkel- und Radialanteil ergibt sich zusätzlich das Zentrifugalpotential

$$h^2 J(J+1)/(8 \pi^2 \mu r_e^2). \quad (2)$$

Für den Gleichgewichtsabstand der Kerne  $r_e$  definiert man die Rotationskonstante

$$B_e = h/(8 \pi^2 \mu r_e^2). \quad (3)$$

Mit Hilfe der WKB-Methode erhielt DUNHAM<sup>6</sup> die Energieeigenwerte

$$E_{v,J} = h \sum_{l,j} Y_{lj} (v + \frac{1}{2})^l J^j (J+1)^j. \quad (4)$$

Die  $Y_{lj}$  sind Funktionen der Potentialkonstanten  $a_n$ , der Schwingungskonstanten  $\omega_e$  und der Rotationskonstanten  $B_e$ . Einige für unsere Auswertung wichtige Energiekoeffizienten sind<sup>6</sup>

$$Y_{01} = B_e \{ 1 + (B_e^2/2 \omega_e^2) [15 + 14 a_1 - 9 a_2 + 15 a_3 - 23 a_1 a_2 + 21 (a_1^2 + a_1^3)/2] \} \quad (5)$$

und in Näherung

$$Y_{11} \approx 6 B_e^2 (1 + a_1)/\omega_e, \quad (6)$$

$$Y_{02} \approx -4 B_e^3/\omega_e^2. \quad (7)$$

Der Potentialverlauf  $V(\xi)$  läßt sich nach MORSE<sup>7</sup> näherungsweise durch die Funktion

$$V(\xi) = D (1 - \exp(-\alpha \xi))^2 \quad (8)$$

darstellen. Hierin bedeuten  $D$  die Dissoziationsenergie der Molekel und  $\alpha$  eine Potentialkonstante. Entwickelt man Gl. (8) in eine Reihe nach  $\xi$ , dann ergibt ein Koeffizientenvergleich mit dem DUNHAM-

<sup>1</sup> J. HOEFT, Z. Naturforsch. **19 a**, 1134 [1964]; **20 a**, 313, 826, 1327 [1965].

<sup>2</sup> J. HOEFT, Z. Naturforsch. **20 a**, 1122 [1965]; **21 a**, 437, 1240 [1966].

<sup>3</sup> J. HOEFT u. K. MANNS, Z. Naturforsch. **21 a**, 1884 [1966].

<sup>4</sup> J. HOEFT u. H.-P. NOLTING, Z. Naturforsch. **22 a**, 1121 [1967].

<sup>5</sup> Hersteller: Dr. TH. SCHUCHARDT, München.

<sup>6</sup> J. L. DUNHAM, Phys. Rev. **41**, 721 [1932].

<sup>7</sup> P. M. MORSE, Phys. Rev. **34**, 57 [1929].



Molekel	%	$J \rightarrow J+1$	$v$	$\nu$ (MHz)	$\Delta\nu$ (kHz)	Molekel	%	$J \rightarrow J+1$	$v$	$\nu$ (MHz)	$\Delta\nu$ (kHz)
$^{116}\text{Sn}^{125}\text{Te}$	1,0	$4 \rightarrow 5$	0	$13\,193,10 \pm 0,04$	- 11	$^{118}\text{Sn}^{128}\text{Te}$	7,6	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,928,24 \pm 0,04$	- 15
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,831,65 \pm 0,04$	10				1	$12\,898,87 \pm 0,04$	11
$^{116}\text{Sn}^{126}\text{Te}$	2,7	$4 \rightarrow 5$	0	$13\,142,75 \pm 0,04$	- 12				2	$12\,869,52 \pm 0,04$	- 11
			1	$13\,112,68 \pm 0,04$	- 20				3	$12\,840,12 \pm 0,04$	- 7
			2	$13\,082,50 \pm 0,04$	54				4	$12\,810,69 \pm 0,04$	6
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,771,26 \pm 0,04$	- 20			$5 \rightarrow 6$	0	$15\,513,82 \pm 0,04$	5
			1	$15\,735,14 \pm 0,04$	6				1	$15\,478,59 \pm 0,04$	23
			2	$15\,699,00 \pm 0,04$	18				2	$15\,443,37 \pm 0,04$	- 4
			3	$15\,662,89 \pm 0,06$	- 30				3	$15\,408,11 \pm 0,04$	- 19
$^{118}\text{Sn}^{124}\text{Te}$	1,1	$4 \rightarrow 5$	0	$13\,128,36 \pm 0,04$	22				4	$15\,372,78 \pm 0,04$	10
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,753,97 \pm 0,04$	42			$6 \rightarrow 7$	0	$18\,099,45 \pm 0,04$	- 49
$^{120}\text{Sn}^{122}\text{Te}$	0,8	$4 \rightarrow 5$	0	$13\,121,16 \pm 0,04$	- 6				1	$18\,058,32 \pm 0,06$	- 1
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,745,39 \pm 0,04$	- 52				2	$18\,017,11 \pm 0,06$	89
$^{117}\text{Sn}^{126}\text{Te}$	1,4	$4 \rightarrow 5$	0	$13\,084,15 \pm 0,04$	14	$^{120}\text{Sn}^{126}\text{Te}$	6,2	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,914,56 \pm 0,04$	- 9
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,700,92 \pm 0,04$	31				1	$12\,885,26 \pm 0,04$	- 6
			1	$15\,665,10 \pm 0,04$	- 2				2	$12\,855,96 \pm 0,04$	- 32
$^{118}\text{Sn}^{125}\text{Te}$	1,7	$4 \rightarrow 5$	0	$13\,077,09 \pm 0,04$	- 9				3	$12\,826,61 \pm 0,04$	- 31
			1	$13\,047,23 \pm 0,04$	- 1			$5 \rightarrow 6$	0	$15\,497,42 \pm 0,04$	- 4
			2	$13\,017,35 \pm 0,04$	- 3				1	$15\,462,25 \pm 0,04$	9
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,692,45 \pm 0,04$	2				2	$15\,427,08 \pm 0,04$	- 11
			1	$15\,656,61 \pm 0,04$	18				3	$15\,391,83 \pm 0,04$	20
$^{116}\text{Sn}^{128}\text{Te}$	4,6	$4 \rightarrow 5$	0	$13\,044,22 \pm 0,04$	14			$6 \rightarrow 7$	0	$18\,080,26 \pm 0,04$	- 3
			1	$13\,014,49 \pm 0,04$	4				1	$18\,039,27 \pm 0,06$	- 29
			2	$12\,984,76 \pm 0,04$	- 35	$^{117}\text{Sn}^{130}\text{Te}$	2,6	$4 \rightarrow 5$	3	$12\,802,46 \pm 0,04$	- 23
			3	$12\,954,96 \pm 0,04$	- 28			$5 \rightarrow 6$	1	$15\,433,03 \pm 0,06$	60
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,653,02 \pm 0,04$	15	$^{119}\text{Sn}^{128}\text{Te}$	2,7	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,871,60 \pm 0,04$	- 16
			1	$15\,617,32 \pm 0,04$	27				1	$12\,842,43 \pm 0,04$	3
			2	$15\,581,62 \pm 0,04$	5			$5 \rightarrow 6$	0	$15\,445,85 \pm 0,04$	7
		$6 \rightarrow 7$	0	$18\,261,85 \pm 0,04$	- 39				1	$15\,410,90 \pm 0,04$	- 25
			1	$18\,220,25 \pm 0,06$	- 75				2	$15\,375,81 \pm 0,04$	51
$^{118}\text{Sn}^{126}\text{Te}$	4,5	$4 \rightarrow 5$	0	$13\,026,74 \pm 0,04$	- 10			$6 \rightarrow 7$	0	$18\,020,05 \pm 0,06$	55
			1	$12\,997,06 \pm 0,04$	- 10	$^{118}\text{Sn}^{130}\text{Te}$	8,3	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,832,74 \pm 0,04$	- 14
			2	$12\,967,34 \pm 0,04$	1				1	$12\,803,70 \pm 0,04$	7
			3	$12\,937,62 \pm 0,04$	- 12				2	$12\,774,67 \pm 0,04$	- 10
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,632,01 \pm 0,04$	21				3	$12\,745,60 \pm 0,04$	- 11
			1	$15\,596,42 \pm 0,04$	- 6			$5 \rightarrow 6$	4	$12\,716,50 \pm 0,04$	- 2
			2	$15\,560,72 \pm 0,04$	44				0	$15\,399,21 \pm 0,04$	17
		$6 \rightarrow 7$	0	$18\,237,34 \pm 0,04$	- 34				1	$15\,364,40 \pm 0,04$	4
			1	$18\,195,78 \pm 0,06$	- 26				2	$15\,329,52 \pm 0,04$	28
$^{120}\text{Sn}^{124}\text{Te}$	1,5	$4 \rightarrow 5$	0	$13\,016,23 \pm 0,04$	- 27				3	$15\,294,65 \pm 0,04$	13
			1	$12\,986,53 \pm 0,04$	29				4	$15\,259,79 \pm 0,04$	- 37
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,619,40 \pm 0,04$	- 2			$6 \rightarrow 7$	5	$15\,224,80 \pm 0,04$	23
$^{117}\text{Sn}^{128}\text{Te}$	2,4	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,985,65 \pm 0,04$	9				0	$17\,965,67 \pm 0,04$	34
			1	$12\,956,10 \pm 0,04$	19				1	$17\,925,09 \pm 0,06$	- 13
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,582,74 \pm 0,04$	6				2	$17\,884,47 \pm 0,06$	- 59
$^{119}\text{Sn}^{126}\text{Te}$	1,6	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,970,10 \pm 0,04$	- 10	$^{120}\text{Sn}^{128}\text{Te}$	10,4	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,816,03 \pm 0,04$	15
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,564,03 \pm 0,04$	32				1	$12\,787,09 \pm 0,04$	- 7
$^{120}\text{Sn}^{125}\text{Te}$	2,3	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,964,89 \pm 0,04$	12				2	$12\,758,12 \pm 0,04$	- 27
			1	$12\,935,45 \pm 0,04$	- 17				3	$12\,729,08 \pm 0,04$	- 1
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,557,80 \pm 0,04$	38			$5 \rightarrow 6$	4	$12\,700,03 \pm 0,04$	14
$^{116}\text{Sn}^{130}\text{Te}$	4,9	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,948,75 \pm 0,04$	- 15				0	$15\,379,18 \pm 0,04$	30
			1	$12\,919,35 \pm 0,04$	- 29				1	$15\,344,47 \pm 0,04$	- 15
			5	$12\,801,41 \pm 0,06$	11				2	$15\,309,67 \pm 0,04$	- 3
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,538,46 \pm 0,04$	- 23				3	$15\,274,83 \pm 0,04$	20
			1	$15\,503,13 \pm 0,04$	11				4	$15\,239,98 \pm 0,04$	29
			3	$15\,432,44 \pm 0,06$	11				5	$15\,205,16 \pm 0,04$	- 13
			4	$15\,397,02 \pm 0,06$	46			$6 \rightarrow 7$	0	$17\,942,31 \pm 0,04$	41
		$6 \rightarrow 7$	0	$18\,128,07 \pm 0,04$	45				1	$17\,901,82 \pm 0,04$	- 17
			1	$18\,087,02 \pm 0,06$	- 85				2	$17\,861,26 \pm 0,06$	- 43
						$^{122}\text{Sn}^{126}\text{Te}$	0,9	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,806,02 \pm 0,04$	- 2
								$5 \rightarrow 6$	0	$15\,367,17 \pm 0,04$	8

Tab. 1. Fortsetzung auf S. 1036.

Molekel	%	$J \rightarrow J+1$	$v$	$\nu$ (MHz)	$\Delta\nu$ (kHz)
$^{119}\text{Sn}^{130}\text{Te}$	3,0	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,776,08 \pm 0,04$	5
			1	$12\,747,27 \pm 0,04$	-13
		$5 \rightarrow 6$	0	$15\,331,26 \pm 0,04$	-2
			1	$15\,296,67 \pm 0,04$	-5
		$6 \rightarrow 7$	0	$17\,886,48 \pm 0,06$	-73
$^{120}\text{Sn}^{130}\text{Te}$	11,3	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,720,55 \pm 0,04$	-5
			1	$12\,691,91 \pm 0,04$	-4
			2	$12\,663,26 \pm 0,04$	-20
			3	$12\,634,54 \pm 0,04$	10
			4	$12\,605,82 \pm 0,04$	20
		$5 \rightarrow 6$	5	$12\,577,13 \pm 0,04$	-17
			6	$12\,548,37 \pm 0,04$	2
			0	$15\,264,62 \pm 0,04$	-9
			1	$15\,230,24 \pm 0,04$	4
			2	$15\,195,85 \pm 0,04$	-6
		$3 \rightarrow 4$	3	$15\,161,41 \pm 0,04$	6
			4	$15\,126,97 \pm 0,04$	-6
			5	$15\,092,51 \pm 0,04$	-18
$^{122}\text{Sn}^{128}\text{Te}$	1,5	$6 \rightarrow 7$	0	$17\,808,70 \pm 0,04$	-48
			1	$17\,768,59 \pm 0,04$	-33
			2	$17\,728,43 \pm 0,06$	-5
$^{124}\text{Sn}^{126}\text{Te}$	1,1	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,707,53 \pm 0,04$	-18
			0	$15\,248,94 \pm 0,04$	30
$^{122}\text{Sn}^{130}\text{Te}$	1,6	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,612,02 \pm 0,04$	-9
			0	$15\,134,40 \pm 0,04$	-30
$^{124}\text{Sn}^{128}\text{Te}$	1,9	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,602,49 \pm 0,04$	-37
			0	$15\,122,90 \pm 0,04$	1
$^{124}\text{Sn}^{130}\text{Te}$	2,1	$4 \rightarrow 5$	0	$12\,506,95 \pm 0,04$	1
			0	$15\,008,28 \pm 0,04$	20
			1	$14\,974,76 \pm 0,04$	35

Tab. 1. Linienfrequenzen. Die letzte Spalte enthält die Differenzen  $\Delta\nu$  zwischen den berechneten und gemessenen Linienfrequenzen.

Ansatz (1) folgende Relationen zwischen den Potentialkoeffizienten

$$\begin{aligned} a_0 &= D a^2, & a_1 &= -a, & a_2 &= 7 a^2/12, \\ a_3 &= -a^3/4, & a_4 &= 31 a^4/360, & a_5 &= -a^5/40, \dots \end{aligned} \quad (9)$$

Unter Voraussetzung des MORSE-Potentials (8) lassen sich mit den Beziehungen (9) die Energiekoeffizienten  $Y_{ij}^M$  berechnen. Der Index M ist zur Unterscheidung von den DUNHAM-Energiekoeffizienten [Gln. (4) bis (7)] hinzugefügt. Die für unsere Auswertung benötigten Koeffizienten sind nachstehend aufgeführt:

$$Y_{00}^M = 0, \quad Y_{10}^M = \omega_e, \quad (10)$$

$$Y_{20}^M = -B_e a^2, \quad (11)$$

$$Y_{01}^M = B_e \{ 1 + (B_e/2 \omega_e^2) [15 - 14 a + 21 a^2/4 - 5 a^3/6] \}, \quad (12)$$

$$Y_{11}^M \approx 6(B_e^2/\omega_e^2) [1 - a], \quad (13)$$

$$Y_{21}^M = 6(B_e^3/\omega_e^2) [5 - 10 a + 23 a^2/4 - 7 a^3/6], \quad (14)$$

$$Y_{31}^M = 20(B_e^4/\omega_e^3) [7 - 21 a + 139 a^2/6 - 25 a^3/2 + 109 a^4/30 - a^5/2], \quad (15)$$

$$Y_{02}^M \approx -4 B_e^3/\omega_e^2, \quad (16)$$

$$Y_{12}^M = -12(B_e^4/\omega_e^3) [19 - 9 a + 13 a^2/6] \quad (17)$$

$$\text{mit} \quad \omega_e = (a/2 \pi r_e) \sqrt{2 D/\mu}. \quad (18)$$

Für  $Y_{11}^M$  und  $Y_{02}^M$  sind hier entsprechend der erreichten Meßgenauigkeit Näherungsausdrücke angegeben.

Aus Gl. (4) folgt für Rotationsübergänge in Absorption ( $\Delta v = 0$ ,  $\Delta J = +1$ ) die Übergangsfrequenz

$$\begin{aligned} \nu_{v, J \rightarrow J+1} &= 2 \{ Y_{01} + Y_{11} (v + \frac{1}{2}) + Y_{21} (v + \frac{1}{2})^2 \\ &\quad + Y_{31} (v + \frac{1}{2})^3 + \dots \} (J+1) \\ &\quad + 4 \{ Y_{02} + Y_{12} (v + \frac{1}{2}) + \dots \} (J+1)^3 \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (19)$$

Zur Auswertung des Rotationsspektrums des SnTe wurden zwei Methoden angewandt.

#### Methode I:

Die Rotationsspektren der einzelnen isotopen Molekeln werden grundsätzlich getrennt ausgewertet. Die Auswertung nach Gl. (19) beschränkt sich entsprechend der erreichten Meßgenauigkeit auf die Koeffizienten  $Y_{01}$ ,  $Y_{11}$ ,  $Y_{21}$  und  $Y_{02}$ . Voraussetzung dafür sind vier Linien, die zu mindestens zwei Rotationsübergängen und drei Schwingungszuständen gehören. Liegen mehr als vier derartige Messungen vor, dann wird eine Ausgleichsrechnung nach der Gaußschen Methode der kleinsten Fehlerquadrate durchgeführt. Reicht die Zahl der gemessenen Linien nicht aus, oder erfüllen die Linien die obige Voraussetzung nicht, dann werden entsprechende Energiekoeffizienten mit den aus den Gln. (3), (12), (13), (14), (16) und (18) folgenden Massenrelationen

$$Y_{01} \sim 1/\mu, \quad Y_{11} \sim 1/\mu^{3/2}, \quad Y_{21}, Y_{02} \sim 1/\mu^2 \quad (20)$$

aus den Koeffizienten der getrennt auswertbaren Isotopenkombinationen berechnet und als bekannt

in das Gleichungssystem eingesetzt. Hierzu mittelt man über alle getrennt auswertbaren isotopen Molekeln. Eine Mittelung über die Konstante  $Y_{01}$  wird vermieden, da sie bei Rotationsübergängen den Hauptanteil der Energie beschreibt. Man erhält so für die getrennt auswertbaren Isotopenkombinationen die Konstanten  $Y_{01}$ , aus Gl. (12) die Rotationskonstanten  $B_e$  und daraus mit Gl. (3) die Gleichgewichtsabstände der Kerne  $r_e$ .

Unter der Annahme, daß die Kernabstände  $r_e$  isotoper Molekeln gleich sind, lassen sich Massenverhältnisse isotoper Atome nach der Beziehung<sup>8</sup>

$$^1M/^2M = (M/^2M) ({}^2B_e/{}^1B_e) \cdot [1 + (M/^2M) - ({}^2B_e/{}^1B_e)]^{-1} \quad (21)$$

berechnen.  ${}^1B_e$  und  ${}^2B_e$  bedeuten die Rotationskonstanten zweier isotoper Molekeln  ${}^1AB$  und  ${}^2AB$ ,  $M$  die Masse des Atoms  $B$ .

#### Methode II:

Es wird über alle Isotopenkombinationen gemittelt. Voraussetzung dafür ist, daß keine Isotopieeffekte auftreten, die durch die Beziehungen (20) nicht beschrieben werden. Mit den Relationen (20) werden alle gemessenen Linien auf die häufigste Isotopenkombination umgerechnet. Man erhält dann im allgemeinen ein überbestimmtes Gleichungssystem für die vier Unbekannten  $Y_{01}$ ,  $Y_{11}$ ,  $Y_{21}$  und  $Y_{02}$ , so daß eine Ausgleichsrechnung nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate durchgeführt werden muß. Liegen „genügend“ viele Meßwerte vor, so kann man versuchen, nach mehr als vier Konstanten auszuwerten. An Gl. (15) und (17) erkennt man, daß  $Y_{31}^M$  und  $Y_{12}^M$  denselben Quotienten in  $B_e$  und  $\omega_e$  besitzen ( $Y_{31}$ ,  $Y_{12} \sim \mu^{5/2}$ ), der im wesentlichen die Größenordnung dieser Koeffizienten bestimmt. Bei einer Erweiterung der Auswertung müssen also beide Größen einbezogen werden. Unter der obigen Voraussetzung wird diese Auswertmethode im Vergleich zu Methode I Rotationskonstanten mit kleineren Fehlern liefern. Diese Aussage gilt nur für rein statistische Fehler.

Unsere Auswertung wurde auf einem programmgesteuerten Digitalrechner (Siemens 2002) durchgeführt.

Zur Berechnung der reduzierten Massen  $\mu$  der isotopen Molekeln wurden die Tabellen der relativen

Atommassen (bezogen auf  ${}^{12}\text{C}$ ) von MATTAUCH, THIELE und WAPSTRA<sup>9</sup> verwendet. Ferner wurden zur Berechnung der Kernabstände  $r_e$  der Wert der Planckschen Konstanten

$$h/2\pi = (1,054\,494 \pm 0,000\,025) \cdot 10^{-27} \text{ erg s}$$

und der Wert der auf  ${}^{12}\text{C}$  bezogenen atomaren Masseneinheit

$$u = (1,660\,43 \pm 0,000\,02) \cdot 10^{-24} \text{ g}$$

einer Zusammenstellung der Naturkonstanten von COHEN und DUMOND<sup>10</sup> entnommen.

Die Auswertung nach Methode I zeigt, daß die relative Abweichung zwischen  $Y_{01}^M$  und  $B_e$  entsprechend Gl. (12) in der Größenordnung  $1 \cdot 10^{-7}$  liegt. Da diese Abweichung klein gegen den Meßfehler ist, können  $Y_{01}^M$  und  $B_e$  gleichgesetzt werden. In Tab. 2 sind die nach Gl. (3) berechneten Kernabstände  $r_e$

Molekel	$r_e$ [Å]	Molekel	$r_e$ [Å]
${}^{120}\text{Sn}{}^{130}\text{Te}$	2,522 803 (6)	${}^{116}\text{Sn}{}^{125}\text{Te}$	2,522 798 (15)
${}^{120}\text{Sn}{}^{128}\text{Te}$	2,522 806 (7)	${}^{119}\text{Sn}{}^{130}\text{Te}$	2,522 808 (11)
${}^{120}\text{Sn}{}^{126}\text{Te}$	2,522 801 (8)	${}^{119}\text{Sn}{}^{128}\text{Te}$	2,522 802 (13)
${}^{120}\text{Sn}{}^{125}\text{Te}$	2,522 802 (17)	${}^{119}\text{Sn}{}^{126}\text{Te}$	2,522 794 (15)
${}^{120}\text{Sn}{}^{122}\text{Te}$	2,522 811 (15)	${}^{117}\text{Sn}{}^{130}\text{Te}$	2,522 791 (20)
${}^{120}\text{Sn}{}^{124}\text{Te}$	2,522 792 (17)	${}^{117}\text{Sn}{}^{128}\text{Te}$	2,522 805 (17)
${}^{118}\text{Sn}{}^{130}\text{Te}$	2,522 805 (7)	${}^{117}\text{Sn}{}^{126}\text{Te}$	2,522 803 (14)
${}^{118}\text{Sn}{}^{128}\text{Te}$	2,522 800 (7)	${}^{122}\text{Sn}{}^{130}\text{Te}$	2,522 804 (14)
${}^{118}\text{Sn}{}^{126}\text{Te}$	2,522 803 (9)	${}^{122}\text{Sn}{}^{128}\text{Te}$	2,522 793 (15)
${}^{118}\text{Sn}{}^{125}\text{Te}$	2,522 798 (13)	${}^{122}\text{Sn}{}^{126}\text{Te}$	2,522 801 (15)
${}^{118}\text{Sn}{}^{124}\text{Te}$	2,522 802 (15)	${}^{124}\text{Sn}{}^{130}\text{Te}$	2,522 799 (14)
${}^{116}\text{Sn}{}^{130}\text{Te}$	2,522 800 (9)	${}^{124}\text{Sn}{}^{128}\text{Te}$	2,522 791 (15)
${}^{116}\text{Sn}{}^{128}\text{Te}$	2,522 809 (9)	${}^{124}\text{Sn}{}^{126}\text{Te}$	2,522 798 (15)
${}^{116}\text{Sn}{}^{126}\text{Te}$	2,522 802 (13)		
$\bar{r}_e = (2,522\,803\,7 \pm 0,000\,002\,0) \text{ Å}$			

Tab. 2. Gleichgewichtsabstände der Kerne. Zahlen in Klammern sind Meßfehler in Einheiten der letzten Dezimalen.

einzelner isotoper Molekeln aufgeführt. Innerhalb der Fehlergrenzen stimmen die Werte überein. Daher ist am Schluß der Tabelle der Mittelwert mit seinem mittleren quadratischen Fehler angegeben. Der Fehler der in die Rechnung eingehenden Naturkonstanten  $h$  und  $u$  ist nicht berücksichtigt. Nach Beziehung (21) sind die in den Tab. 3 und 4 angegebenen Massenverhältnisse von Zinn- und Tellurisotopen berechnet. Zum Vergleich sind die mit Hilfe der Tabellen von MATTAUCH<sup>9</sup> und Mitarbeitern

<sup>8</sup> C. H. TOWNES u. A. L. SCHAWLOW, Microwave Spectroscopy, McGraw-Hill Book Co., London 1955.

<sup>9</sup> J. H. E. MATTAUCH, W. THIELE u. A. H. WAPSTRA, Nucl. Phys. 67, 1 [1965].

<sup>10</sup> E. R. COHEN u. J. W. M. DUMOND, Rev. Mod. Phys. 37, 537 [1965].



Sn ${}^1M/{}^2M$	Te $M$	Massenverhältnis
120/118	130	1,016 966 (13)
	128	1,016 977 (15)
	126	1,016 966 (18)
	125	1,016 973 (32)
Mittelwert		1,016 969 8
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,016 968 3
120/116	130	1,034 521 (16)
	128	1,034 511 (17)
	126	1,034 515 (23)
Mittelwert		1,034 516 1
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,034 515 9
120/119	130	1,008 393 (19)
	128	1,008 406 (22)
Mittelwert		1,008 398 5
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,008 400 8
120/117	130	1,025 674 (31)
	128	1,025 657 (27)
	126	1,025 653 (25)
Mittelwert		1,025 659 9
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,025 655 8
120/122	130	0,983 583 (24)
	128	0,983 602 (24)
Mittelwert		0,983 592 5
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,983 583 4
120/124	130	0,967 698 (24)
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,967 692 5
118/116	130	1,017 263 (17)
	128	1,017 241 (17)
	126	1,017 256 (23)
Mittelwert		1,017 252 9
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,017 254 8
118/119	130	0,991 571 (19)
	128	0,991 572 (22)
	126	0,991 589 (26)
Mittelwert		0,991 575 6
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,991 575 4
118/117	130	1,008 563 (31)
	128	1,008 535 (27)
	126	1,008 542 (25)
Mittelwert		1,008 545 2
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,008 542 5
118/122	130	0,967 174 (24)
	128	0,967 182 (24)
	126	0,967 175 (26)

Tab. 3. Massenverhältnisse der Zinnisotope.

Tab. 3. Massenverhältnisse der Zinnisotope. Die Fehlerangaben in Klammern beziehen sich auf die letzten beiden Dezimalen.  
 Tab. 4. Massenverhältnisse der Tellurisotope. Die Fehlerangaben in Klammern beziehen sich auf die letzten beiden Dezimalen.

Sn ${}^1M/{}^2M$	Te $M$	Massenverhältnis
Mittelwert		0,967 176 9
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,967 172 1
118/124	130	0,951 554 (24)
	128	0,951 560 (25)
	126	0,951 554 (26)
Mittelwert		0,951 555 8
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,951 546 3
116/119	130	0,974 744 (21)
	128	0,974 766 (23)
Mittelwert		0,974 754 0
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,974 756 2
116/117	130	0,991 448 (32)
	128	0,991 441 (28)
	126	0,991 433 (29)
Mittelwert		0,991 440 0
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,991 435 5
116/122	130	0,950 761 (25)
	128	0,950 789 (25)
Mittelwert		0,950 775 0
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,950 766 8
116/124	130	0,935 407 (25)
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,935 406 1
119/117	130	1,017 137 (34)
	128	1,017 107 (32)
Mittelwert		1,017 120 9
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,017 111 2
119/122	130	0,975 396 (27)
	128	0,975 403 (29)
Mittelwert		0,975 399 5
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,975 389 3
119/124	130	0,959 644 (27)
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,959 630 8
117/122	130	0,958 962 (38)
	128	0,958 997 (33)
Mittelwert		0,958 981 7
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,958 980 0
122/124	130	0,983 851 (31)
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,983 843 9
124/117	130	1,059 912 (38)
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,059 898 5

Te ${}^1M/{}^2M$	Sn $M$	Massenverhältnis
130/128	120	1,015 657 (14)
	118	1,015 659 (16)
	116	1,015 636 (21)
	119	1,015 661 (28)
	117	1,015 628 (42)
	122	1,015 668 (33)
Mittelwert		1,015 654 1
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,015 650 4
130/126	120	1,031 797 (16)
	118	1,031 797 (18)
	116	1,031 790 (26)
	117	1,031 773 (39)
Mittelwert		1,031 794 1
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,031 793 6
130/125	120	1,040 048 (29)
	118	1,040 057 (23)
Mittelwert		1,040 053 5
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,040 045 2
130/124	120	1,048 471 (29)
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,048 452 4
128/126	120	1,015 901 (17)
	118	1,015 890 (18)
	116	1,015 906 (25)
	119	1,015 908 (32)
	117	1,015 897 (35)
Mittelwert		1,015 898 7
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,015 894 3
128/125	120	1,024 025 (29)
	118	1,024 022 (23)
Mittelwert		1,024 023 2
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,024 018 8
128/124	120	1,032 319 (29)
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,032 296 5
126/125	120	1,007 997 (30)
	118	1,008 005 (24)
Mittelwert		1,008 001 9
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,007 997 3
126/124	120	1,016 161 (30)
MATTAUCH <sup>9</sup>		1,016 145 6
124/125	120	0,991 966 (38)
MATTAUCH <sup>9</sup>		0,991 981 3

Tab. 4. Massenverh. der Tellurisotope.

berechneten Massenverhältnisse aufgeführt. Der Fehler dieser Vergleichswerte ist von der Größenordnung  $1 \cdot 10^{-7}$ . Im Rahmen unserer Meßgenauigkeit zeigt sich gute Übereinstimmung.

Die gute Übereinstimmung der Kernabstände in Tab. 2 und die geringen Abweichungen der Massen-

verhältnisse von Vergleichswerten in den Tab. 3 und 4 rechtfertigen die Anwendung der Auswertemethode II. Die Ausgleichsrechnung wurde für die DUNHAM-Energiekoeffizienten  $Y_{01}$ ,  $Y_{11}$ ,  $Y_{21}$ ,  $Y_{31}$ ,  $Y_{02}$  und  $Y_{12}$  durchgeführt. Für  $Y_{12}$  übersteigt der Fehler den Wert der Konstanten. Sie wird daher

nicht angegeben. In Tab. 5 sind die Ergebnisse der Ausgleichsrechnung für die häufigste Molekel  $^{120}\text{Sn}^{130}\text{Te}$  zusammengestellt. Angegeben sind die mittleren quadratischen Fehler. Die letzte Spalte der Tab. 1 enthält die Differenzen zwischen den mit den DUNHAM-Koeffizienten der Tab. 5 berechneten

$Y_{01} =$	(1 273,493 59	$\pm 0,000 95)$	MHz
$Y_{11} =$	— (2,860 9	$\pm 0,001 0)$	MHz
$Y_{21} =$	— (0,001 60	$\pm 0,000 42)$	MHz
$Y_{31} =$	(0,000 055	$\pm 0,000 048)$	MHz
$Y_{02} =$	— (0,000 165	$\pm 0,000 010)$	MHz
$a_0 =$	(3,28	$\pm 0,21) \cdot 10^5$	$\text{cm}^{-1}$
$a_1 =$	— 3,082	$\pm 0,065$	
$\omega_e =$	(236,2	$\pm 7,5)$	$\text{cm}^{-1}$
$D =$	(4,29	$\pm 0,42)$	eV
$a =$	3,082	$\pm 0,065$	
$Y_{21}^M =$	— (0,001 32	$\pm 0,000 22)$	MHz
$Y_{12}^M =$	— (0,2	$\pm 0,1)$	Hz
$Y_{20}^M =$	— (0,403	$\pm 0,017)$	$\text{cm}^{-1}$
$r_e = (2,522\,803\,5 \pm 0,000\,028^* \pm 0,000\,001\,0^{**}) \text{ \AA}$			

\* Fehler durch Naturkonstanten, \*\* Meßfehler.

Tab. 5. Konstanten für  $^{120}\text{Sn}^{130}\text{Te}$ .

Linienfrequenzen und den gemessenen. Diese Differenzen ergeben in guter Näherung eine Normalverteilung mit der Streuung  $\sigma = 20 \text{ kHz}$ . Als Meßfehler werden von uns in fast allen Fällen  $\pm 40 \text{ kHz}$  angegeben ( $\pm 1/10$  Linienbreite). Dieses statistische Verhalten spricht für die Konsistenz der Meßwerte und die Anwendbarkeit der Auswertemethode II. Tab. 5 enthält ferner die nach Formel (7) berechnete Schwingungskonstante  $\omega_e$  und die nach (1')

und (9) berechneten DUNHAM-Potentialkoeffizienten  $a_0$  und  $a_1$ . Aus Gl. (13) und (18) folgen die Konstanten  $D$  und  $a$  für das MORSE-Potential. Aus Gl. (11) erhält man die Konstante  $-Y_{20}^M = \omega_e x_e$ . Aus Gl. (3) ergibt sich schließlich der Gleichgewichtsabstand der Kerne  $r_e$ . Für den Kernabstand sind getrennt der Meßfehler und der Fehler der durch die in die Rechnung eingehenden Naturkonstanten angegeben.

In Tab. 6 werden unsere Ergebnisse für  $\omega_e$  und  $\omega_e x_e$  mit denen von VAGO und BARROW<sup>11</sup> aus bandenspektroskopischen Messungen verglichen. Ihre Werte beziehen sich auf keine bestimmte Isotopenkombination. Daher sind unsere Werte in Tab. 6 auf den Schwerpunkt aller isotopen Molekeln bezogen.

	Diese Arbeit	VAGO u. BARROW <sup>11</sup>
$\omega_e$	237,6 $\pm 7,5$	259,5
$\omega_e x_e$	0,408 $\pm 0,017$	0,50

Tab. 6. Schwingungskonstanten des SnTe, bezogen auf den Schwerpunkt aller isotopen Molekeln.

Herrn Professor Dr. R. HONERJÄGER danken wir herzlich für seine großzügige Förderung und sein reges Interesse an dieser Arbeit. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danken wir für die finanzielle Unterstützung unserer Forschungsvorhaben.

<sup>11</sup> R. F. BARROW u. E. E. VAGO, Proc. Phys. Soc. London **56**, 78 [1944]. — E. E. VAGO u. R. F. BARROW, Proc. Phys. Soc. London **58**, 707 [1946].