

$$V(r) = \frac{\varepsilon}{2} \left[(1+\gamma) \left(\frac{r_m}{r} \right)^{12} - 4\gamma \left(\frac{r_m}{r} \right)^6 - 3(1-\gamma) \left(\frac{r_m}{r} \right)^4 \right] \quad (1)$$

errechnet waren^{6,7} ($r_m = \text{Ar} - \text{H}^+$ -Abstand beim Potentialminimum; γ = Parameter für den Anteil des r^{-6} -Anziehungspotentials). Die Abhängigkeit von $\Theta_r(E_r)$ nach Abb. 2 spricht dafür, daß $\gamma < 0,5$. Man erhielt $\varepsilon = 2,48$ eV in guter Übereinstimmung mit dem von HERRERO et al.³ angegebenen Wert. Er dürfte freilich mit einem systematischen Fehler von etwa 10% behaftet sein, weil die Bestimmung von ε aus der Winkellage des Maximums des klassischen primären Regenbogens einen zu geringen ε -Wert liefert⁴.

Der Winkelabstand $\Delta\theta$ (Schwerpunktsystem) zwischen zwei benachbarten Maxima der überlagerten Interferenzen betrug in Abb. 2 $1,14^\circ$. Der Gleichgewichtsabstand r_m ergibt sich in guter Näherung zu⁴

$$r_m \approx \lambda/2 \Delta\theta, \quad (2)$$

wobei λ die De Broglie-Wellenlänge des einfallenden Protons ist. Mit $\lambda = 0,58 \cdot 10^{-9}$ cm bei 25 eV Protonenenergie errechnete man r_m zu $1,46 \text{ \AA}$. Aus Messungen

der überlagerten Interferenzen bei verschiedenen Energien ergab sich als Mittelwert:

$$r_m = 1,49 \text{ \AA}.$$

Dieser Abstand ist demnach etwas größer als der Gleichgewichtsabstand von $1,27 \text{ \AA}$ in der isoelektronischen HCl-Molekel.

Der Koeffizient des r^{-4} -Gliedes in Gl. (1) ist, falls die Anziehung zwischen dem H^+ -Ion und dem Ar-Atom durch die Ion-induzierte Dipolkraft zustande kommt, gleich

$$e^2 a/2 = \frac{\varepsilon}{2} 3(1-\gamma) r_m^4. \quad (2)$$

Mit $\gamma = 0$ und $0,5$ errechnen sich für $\varepsilon = 2,48$ eV und eine Polarisierbarkeit des Ar von $1,645 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3$ Werte für r_m von $1,34$ und $1,59 \text{ \AA}$.

Herrn Dipl.-Ing. T. FRIESE danken wir für die wertvolle Unterstützung beim Aufbau der Meßelektronik. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft sind wir für finanzielle und personelle Unterstützung zu Dank verbunden.

⁶ E. A. MASON u. J. T. VANDERSLICE, J. Chem. Phys. **31**, 594 [1959].

⁷ G. E. IOUP u. B. S. THOMAS, J. Chem. Phys. **50**, 5009 [1969].

Nuclear Quadrupole Resonance of ^{14}N in Ethylenimine

TAE-KYU HA

Physikalisch-Chemisches Institut der Universität Zürich
Switzerland

and CHESTER T. O'KONSKI

Department of Chemistry, University of California, Berkeley
Berkeley, California, 94720

(Z. Naturforsch. **25 a**, 1155—1156 [1970]; received May 23 1970)

The nuclear quadrupole resonance (NQR) spectra of ^{14}N in ethylenimine have been detected at 77°K . Comparing to the reported microwave experiment on the gaseous state, it is found that the solid state shift in the quadrupole coupling constant is much smaller than that of ammonia.

We would like to report the NQR frequencies and the quadrupole coupling constant of ^{14}N in polycrystalline ethylenimine, measured at 77°K . This is a first pure NQR studies for ^{14}N in any three-membered heterocyclic compound. Ethylenimine used in this work was obtained from Dow Chemical Company. The sample, which is very flammable, is very slowly cooled in

a sealed NQR sample tube to 77°K . The NQR absorption spectra are detected with a marginal Pound-Knight-Watkins type spectrometer, which is described elsewhere¹. Sine-wave frequency modulation with 500 Hz and a frequency counter were employed along with a tank coil of large diameter (~ 8 cm), through which the saturation effect can be avoided. This is one of the crucial factors in ^{14}N -spectroscopy for obtaining a better signal to noise ratio with a relatively high oscillation level of the marginal spectrometer. We observed NQR signals at 3.1610 MHz, 3.1600 MHz, 3.1562 MHz, 2.2185 MHz and 2.2070 MHz. The linewidth (distance of the extrema of the derivative) was ~ 1 kHz. We were also able to detect the difference frequencies at 0.942 MHz and 0.938 MHz and they can be assigned as different frequencies of $3.160 \rightarrow 2.218$ MHz and $3.156 \rightarrow 2.218$ MHz. The upper lines (3.161 MHz and 3.160 MHz) were verified further with various phase adjustments of the detection system because of the possibility that these lines might be due to a single broad line. The doublet lines persisted with change of phase of the detection system.

KEMP and FLYGARE² have recently reported the high-resolution microwave spectra of ethylenimine and obtained the diagonal elements of ^{14}N nuclear quadru-

Sonderdruckanforderungen an Dr. TAE-KYU HA, Physikalisch-Chemisches Institut der Universität Zürich, CH-8001 Zürich, Rämistrasse 76.

¹ C. T. O'KONSKI et al., to be published.

² M. K. KEMP and W. H. FLYGARE, J. Amer. Chem. Soc. **90**, 6267 [1968].



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.

pole coupling constant tensors in ^{14}N principal axis system as well as inertial axis system. Table 1 summarizes our NQR values at 77 °K compared with the microwave data. Difference between both data is 100 kHz in quadrupole coupling constant and 10% in the asymmetry parameter. A quantitative solid state shift, of course, can be evaluated from a temperature dependence studies of the NQR lines and by an extrapolation to the 0 °K. The solid state shift might be then smaller than 100 kHz due to the general trend of the temperature dependency of NQR lines. Considering that the solid state shift for ^{14}N in ammonia (0.61 MHz shift³: gaseous, -4.04 MHz, solid, -3.47 MHz) the shift in ethylenimine is very small. The solid state shift generally can be attributed to both direct and indirect effects of the crystal lattice on the field gradient. The direct effect involves a contribution at the ^{14}N of the reference molecule from the charge distributions of the surrounding molecules, while the indirect effect involves a redistribution of electrons by the crystal field due to the hydrogen bond in the solid state. The most of shift

³ S. S. LEHRER and C. T. O'KONSKI, J. Chem. Phys. **43**, 1941 [1965].

	Microwave (gas)	NQR (solid)
$e Q q_{zz}$	-3.689 ± 0.09 MHz	-3.581 MHz
$e Q q_{xx}$	3.004 ± 0.09 MHz	2.736 MHz
$e Q q_{yy}$	0.685 ± 0.005 MHz	0.845 MHz
η ^a	63%	53%

^a Asymmetry parameter.

Table 1. ^{14}N nuclear quadrupole coupling constants in the principal axis system for ethylenimine.

is due to the indirect effect as we have shown earlier⁴ by the molecular Hartree-Fock-Roothaan SCF calculations on ammonia. A similar ^{14}N NQR line shift due to the hydrogen bond formation in molecular complexes (pyridine-pyrrole system etc.) will be reported elsewhere⁵.

This research was supported by a Grant-In-Aid from the U.S. Public Health Service, Research Grant GM 12082-05, from the National Institute of General Medical Sciences.

⁴ T.-K. HA and C. T. O'KONSKI, J. Chem. Phys. **51**, 460 [1969].

⁵ T.-K. HA and C. T. O'KONSKI, to be published.

Fallout der chinesischen Kernwaffenexplosion vom 29. September 1969

R. WEINREICH, E. KREBS und K. WACHNER

Institut für Anorganische Chemie und Kernchemie der Universität Mainz

(Z. Naturforsch. **25 a**, 1156—1158 [1970]; eingegangen am 23. Juni 1970)

The analysis of fallout from the Chinese nuclear test of September 29th, 1969, showed the typical features of a hydrogen bomb explosion. The fissionable material was probably ^{239}Pu combined with ^{238}U . However, the use of a combination of ^{235}U and ^{238}U employed in all earlier Chinese experiments cannot be excluded.

Am 29. September 1969 unternahm die Volksrepublik China ihren 9. Kernwaffenversuch im Gebiet Lop Nor, Provinz Sinkiang. Die Tagespresse gab eine Sprengkraft von 3 Mt TNT an und charakterisierte den Versuch als Wasserstoffbombenexplosion.

Mittels Wischproben von den Rotoren zweier Linienmaschinen der Lufthansa wurde stratosphärischer Fallout entnommen. Die Maschinen flogen zwischen dem 4. und 7. Oktober die Polarroute Frankfurt/Main—Tokio—Frankfurt/Main. Der Fallout wurde radiochemischen Standardanalysen unterworfen; die Meßergebnisse wurden nach einem von FAHLAND¹ beschriebenen Analysen-

verfahren ausgewertet, das Rückschlüsse auf die häufigste Neutronenenergie, die Neutronenfluenz und das Spaltmaterial des Kernwaffenversuchs gestattet. Dieses Verfahren wurde bereits anlässlich des 8. chinesischen Kernwaffenversuchs vom 27. Dezember 1968 angewandt²; es waren also Vergleiche zwischen dem 8. und 9. Versuch, die beide als Wasserstoffbombenexplosionen deklariert waren, möglich.

In Tab. 1 sind die untersuchten Nuklide mit ihren gemessenen Anfangsaktivitäten und Atomzahlen zusammengestellt. Zum Vergleich sind die entsprechenden Daten des 8. Versuchs² angegeben. ^{95}Zr wurde nicht direkt gemessen, da infolge seiner langen Halbwertszeit die Meßergebnisse durch alten Fallout unkontrollierbar verfälscht würden. Unter Berücksichtigung der Fraktionierung³ wurde die Menge an ^{95}Zr aus den Mengen von ^{140}Ba , ^{147}Nd und ^{153}Sm berechnet.

Die Zusammensetzung des Fallout war auch diesmal, ähnlich wie beim vorhergegangenen chinesischen Wasserstoffbombenversuch, infolge Fraktionierung während der Explosion im Sinne einer Abreicherung des ^{111}Ag gegenüber ^{95}Zr stark verschoben. Der Fraktionierungskorrekturfaktor f_i , der als Maß dieser Veränderung angesehen werden kann, lag bei $f_i=3,6$ (Kernwaffenversuch vom 27. 12. 1968: $f_i=6,8$). Dieser hohe Wert kann durch Explosion in Bodennähe gedeutet werden, bei der der Feuerball einerseits einer relativ schnellen Abkühlung unterworfen und andererseits das Boden-

¹ J. FAHLAND, Z. Naturforsch. **24 a**, 653 [1969].

² J. FAHLAND, Z. Naturforsch. **24 a**, 1832 [1969].

³ E. C. FREILING u. M. A. KAY, Nature London **209**, 236 [1966].