

The level at 1452 keV is proposed according to the appearance of γ rays of energies 291, 391, 408, and 513 keV in our measurements. The 391 and 513 keV γ rays have been observed^{4, 6} before, but they could not be placed in the ^{143}Pr decay scheme. The electric dipole nature of the transitions de-exciting the 1452 keV level indicate a negative parity and a probable spin 5/2 of this level.

^{143}Pr with 59 protons is considered a nearly spherical nucleus with the ^{142}Ce even-even core susceptible for quadrupole vibrations. Since the excited states of the even-even ^{142}Ce show vibrational character, the low lying energy levels of ^{143}Pr could be

explained¹¹ as due to the coupling of the odd proton with its available single-particle states $g_{7/2}$ and $d_{5/2}$ to the quadrupole vibrations of the even-even core. One can expect various levels in the low energy region with spins $1/2+$ to $11/2+$. In other words, a collective character of excitation was to be expected in the energy spectrum of ^{143}Pr . KISSLINGER and SORENSEN¹² have predicted several states with these spins in this energy region. However, as they pointed out, their method may not give accurate results when even a few neutrons are added to the 82 neutron shell because of the approaching deformed region.

¹¹ A. DE SHALIT, Phys. Rev. **122**, 1530 [1961].

¹² L. S. KISSLINGER and R. A. SORENSEN, Rev. Mod. Phys. **35**, 853 [1963].

Streumessungen am System LiCs und das Singulett-Potential dieses Moleküls

H. KANES und H. PAULY

Max-Planck-Institut für Strömungsforschung, Göttingen

und E. VIETZKE *

Physikalisches Institut der Universität Freiburg

(Z. Naturforsch. **26 a**, 689—692 [1971]; eingegangen am 20. Januar 1971)

Total scattering Cross Section Measurements for LiCs and the Singlet Potential of this Molecule

The velocity dependence of the total collision cross section has been measured for the system LiCs in the energy range from 15—1000 eV. Using the observed glory undulation together with spectroscopic data a potential for the singlet ground state of LiCs is proposed.

I. Einleitung

In vorausgegangenen Arbeiten^{1, 2} wurde die Geschwindigkeitsabhängigkeit des totalen Streuquerschnitts für das Stoßpaar NaCs gemessen. Hieraus wurde unter Mitverwendung spektroskopischer Daten und theoretischer Überlegungen das Potential für den Singulettzustand dieses Systems angegeben³. In der vorliegenden Arbeit werden analoge Messungen am Stoßpaar LiCs mitgeteilt und das Potential für den Singulettzustand dieses Systems in entsprechender Weise bestimmt.

II. Apparatur und Meßergebnisse

In der Meßanordnung, deren Einzelheiten in vorausgegangenen Arbeiten^{2, 4} beschrieben sind, wird durch Umladung eines Ionenstrahls ein schneller Alkaliatomstrahl erzeugt⁵. Dieser Strahl kreuzt einen thermischen Alkaliatomstrahl und wird anschließend durch Oberflächenionisation nachgewiesen⁶. Durch eine magnetisch betätigten Blende kann der Targetstrahl an- und abgeschaltet werden, so daß die ungestreute Intensität I_0 und die abgeschwächte Intensität I des Primärstrahls in rascher Folge gemessen werden können. Aus diesen Intensitäten wird durch ein Analogrechensystem direkt der totale Streuquerschnitt gebildet. Einzelheiten des

Sonderdruckanforderungen an Dr. H. PAULY, Max-Planck-Institut für Strömungsforschung, Abt. Molekularstrahlen I, D-3400 Göttingen, Böttigerstr. 6/8.

* Jetzt: Center of Research in Experimental Space Science, Cress York University, Toronto (Kanada).

¹ W. NEUMANN u. H. PAULY, Phys. Letters **20**, 357 [1968].

² W. NEUMANN u. H. PAULY, J. Chem. Phys. **52**, 254 [1970].

³ CH. SCHLIER u. E. VIEZKE, Chem. Phys. Letters **3**, 250 [1969].

⁴ M. HOLLSTEIN u. H. PAULY, Z. Phys. **201**, 10 [1967].

⁵ Die Geometrie der Meßanordnung und damit das Auflösungsvermögen ist dasselbe wie bei den in der vorausgegangenen Arbeit² beschriebenen Messungen am System LiHg.

⁶ M. HOLLSTEIN u. H. PAULY, Z. Phys. **196**, 353 [1966].



Meßverfahrens sind ebenfalls in den oben zitierten Arbeiten^{2, 4} beschrieben.

Abbildung 1 zeigt den totalen Streuquerschnitt als Funktion der Geschwindigkeit für das Stoßpaar LiCs. Die Undulationen können dem Singulett-Potential des Stoßpaars zugeordnet werden, da in diesem Geschwindigkeitsbereich der Querschnitt für die Streuung am Triplet-Potential monotonen Verhalten zeigt.

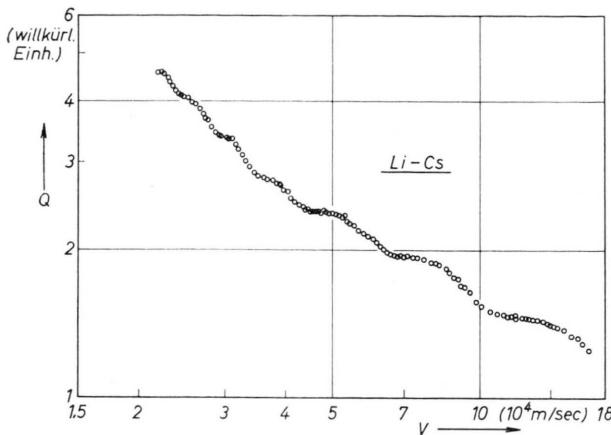


Abb. 1. Totaler Streuquerschnitt Q als Funktion der Geschwindigkeit für das System LiCs (der durchgemessene Geschwindigkeitsbereich entspricht Energien zwischen 15 und 1000 eV).

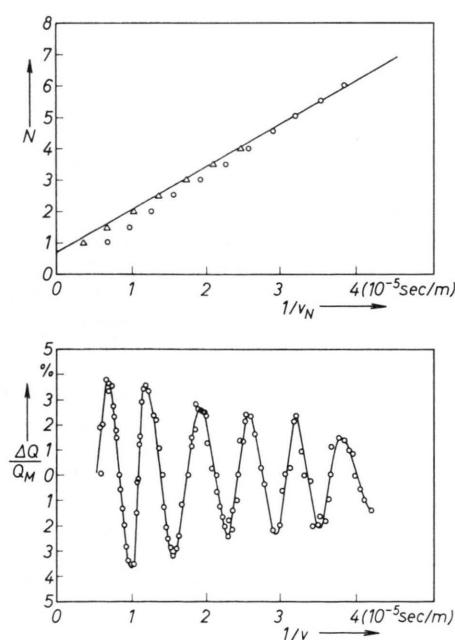


Abb. 2. Meßwerte in der Darstellung $\Delta Q/Q_M$ als Funktion von $1/v$ und der Index der Extrema als Funktion von $1/v_N$. Die Punkte folgen direkt aus den Meßwerten ohne Auflösungskorrektur, die Dreiecke ergeben sich nach Berücksichtigung des Einflusses der endlichen Winkelauflösung der Meßanordnung².

Abbildung 2 zeigt den Querschnitt in der Form $\Delta Q/Q_M$ als Funktion von $1/v$ (Q_M ist der über die Undulationen gemittelte Verlauf des Querschnitts, v ist die Relativgeschwindigkeit) zusammen mit der Darstellung N als Funktion von $1/v_N$ (N = Index der Extrema, v_N = Geschwindigkeit des N -ten Extremums). Aus dieser Darstellung ergibt sich nach Durchführung der in der vorausgegangenen Arbeit² beschriebenen, durch die endliche Winkelauflösung bedingten Korrektur, das Produkt $\varepsilon r_m a_1$. Hierin ist ε die Potentialtopftiefe, r_m der Gleichgewichtsabstand und a_1 ein von der Potentialform abhängiger Entwicklungskoeffizient der Maximalphase.

Aus den vorliegenden Messungen folgt

$$\varepsilon r_m a_1 = 1,4 \pm 0,07 \text{ eV Å.}$$

III. Die Bestimmung des Singulett-Potentials für LiCs

Um das Singulett-Potential für LiCs anzugeben, werden im folgenden, wie in einer vorausgegangenen Arbeit³, neben dem Produkt $\varepsilon r_m a_1$ noch Ergebnisse spektroskopischer Untersuchungen und theoretische Aussagen benutzt.

Die Form des Potentials setzen wir folgendermaßen an:

$$V^*(x) = e^{2y} [1 - Cy^3(1 - By)] - 2e^y \quad \text{für } x \leq 1$$

$$\text{mit } y = \sqrt{\varkappa}/2(1-x), \quad x = r/r_m, \quad V^* = V/\varepsilon$$

und

$$V^*(x) = [f(x) - (f(x) + 1)\Gamma \cdot \exp\{-((x-1)/\gamma)^2\}] \\ [(C_6^*/2)(1 - S(x)) + S(x)] - C_6^* \delta x^{-8}(1 - S(x)) \quad \text{für } x \geq 1$$

$$\text{mit} \quad f(x) = x^{-12} - 2x^{-6}, \\ S(x) = (e^{20(x-1,5)} + 1)^{-1}.$$

Der erste Teil ist ein HULBERT-HIRSCHFELDER-Potential⁷, dessen Parameter B und C durch den Vergleich mit den aus optischen Daten bestimmten Parametern anderer Alkalimoleküle zu $C = 0,25$ und $B = 0,5$ festgelegt werden. \varkappa ist die reduzierte Krümmung des Potentials im Minimum

$$\varkappa = \frac{r_m^2}{\varepsilon} \left(\frac{d^2V}{dr^2} \right)_{r=r_m},$$

die in der Parabelnäherung mit dem Grundschrwingungsquant ω_e durch die Beziehung

$$\varkappa = 4\pi^2 \mu c^2 \omega_e^2 \cdot (r_m^2/\varepsilon) = \alpha/\varepsilon$$

⁷ H. M. HULBERT u. J. O. HIRSCHFELDER, J. Chem. Phys. **9**, 61 [1941].

verknüpft ist. Hierin ist μ die reduzierte Masse und c die Lichtgeschwindigkeit. α ist durch die obige Gleichung definiert.

Der zweite Teil ist ein DÜREN-SCHLIER-Potential⁸ mit modifiziertem van der Waals-Term. $S(x)$ ist eine zu verschiedenen Größen des van der Waals-Teils führende Schaltfunktion. Ferner gilt

$$C_6^* = C_6/\varepsilon r_m^6$$

(reduzierte van der Waals-Konstante)

$$\text{und } \delta = C_8/C_6 r_m^2.$$

Γ und γ ergeben sich schließlich durch genaue Anpassung⁹ an das Hulbert-Hirschfelder-Potential im Abstandsbereich $1 \leq x \leq 1,3$.

Tabelle 1 zeigt die zu verschiedenen reduzierten Krümmungen gehörenden Γ - und γ -Werte.

\varkappa	Γ	γ
12,5	0,81	0,4
15	0,729	0,4
17,5	0,6565	0,397
18,75	0,6345	0,383
20	0,6135	0,369

Tab. 1. Parameter des an das Hulbert-Hirschfelder-Potential angepaßten Düren-Schlier-Potentials für verschiedene reduzierte Krümmungen im Minimum.

Zur Bestimmung der noch freien Parameter \varkappa , C_6^* , δ , ε und r_m benutzen wir folgende Daten:

1. den gemessenen Wert des Produkts

$$P = \varepsilon r_m a_1 = 1,4 \cdot 10^{-8} \text{ eV cm},$$

2. den gemessenen Wert¹⁰ des Grundschwingungsquants

$$\omega_e = 167 \text{ cm}^{-1},$$

3. die theoretischen Werte^{11, 12}

$$C_6 = 1886 \text{ eV \AA}^2 \text{ und } C_8/C_6 = 22 \text{ \AA}^2,$$

4. den theoretischen Wert¹³ für den Gleichgewichtsabstand

$$r_m = 3,54 \text{ \AA}^{14}.$$

Aus 3. und 4. folgt $\delta = 1,76$, aus 2. und 4. folgt

$$\alpha = 4 \pi^2 \mu c^2 \omega_e^2 r_m^2 = 8,46 \text{ eV}.$$

⁸ R. DÜREN u. CH. SCHLIER, J. Chem. Phys. **46**, 4535 [1967].

⁹ Die χ^2 -Summe bei 30 Stützpunkten ist kleiner als $2 \cdot 10^{-3}$.

¹⁰ G. HERZBERG, Molecular Spectra and Molecular Structure I, Spectra of Diatomic Molecules, Van Nostrand, Princeton N.J. 1950.

¹¹ A. DALGARNO u. W. D. DAVISON, Adv. At. Mol. Phys. **2**, 1 [1966].

¹² W. D. DAVISON, J. Phys. B (Proc. Phys. Soc.) **12**, 139 [1968].

¹³ R.-J. KOCH (priv. Mitteilung an CH. SCHLIER, 1969).

Zur Festlegung der weiteren Parameter ε , \varkappa und C_6^* wird der Koeffizient a_1 für das oben angegebene Potential berechnet, und zwar für verschiedene Werte von δ (0 und 1,72), C_6^* (1; 1,5; 2) und die \varkappa -Werte der Tab. 1.

Die 30 berechneten a_1 -Werte werden durch die Beziehung

$$a_1 = A_1 + C_6^* (A_2 + A_3 \delta + A_4 \varkappa) + A_5 \varkappa$$

$$\text{mit } A_1 = 0,552, \quad A_2 = 0,0278, \\ A_3 = 0,00553, \quad A_4 = -0,0004, \\ A_5 = -0,00432$$

sehr gut wiedergegeben (maximale Abweichung 0,2%).

Setzt man hierin

$$a_1 = P/\varepsilon r_m, \quad C_6^* = C_6/\varepsilon r_m^6$$

ein, so ergibt sich durch Auflösung nach ε

$$\varepsilon = \frac{1}{2 A_1} \left[\frac{P}{r_m} - A_5 \alpha - (A_2 + A_3 \delta) \frac{C_6}{r_m^6} \right] \\ + \sqrt{\frac{1}{4 A_1^2} \left(\frac{P}{r_m} - A_5 \alpha - (A_2 + A_3 \delta) \frac{C_6}{r_m^6} \right)^2 - \frac{A_4 C_6 \alpha}{A_1 r_m^6}}.$$

Das Einsetzen der Zahlwerte ergibt

$$\varepsilon = 0,72 \text{ eV} \text{ und damit } C_6^* = 1,34, \quad \varkappa = 11,9.$$

Gegenüber Veränderungen der Potentialform im Abstandsbereich $x < 1$ ist die Potentialtopftiefe ε unempfindlich. Dies zeigen Berechnungen von a_1 , bei denen ein Düren-Schlier-Potential für den ganzen Abstandsbereich angenommen wurde (vgl. Abb. 3). Bei festgehaltenem $\gamma = 0,4$ wurde a_1 für Werte von \varkappa zwischen 10 und 20 in Schritten von 2, 5 und für die oben benutzten Werte von δ und C_6^* berechnet¹⁷. Diese 30 berechneten Werte für a_1 lassen sich gut (maximale Abweichung 0,08%) in der Form $a_1 = 0,512 + C_6^* (0,02285 + 0,0056 \delta) - 0,00209 \varkappa$ darstellen, woraus

$$\varepsilon = 0,74 \text{ eV}, \quad C_6^* = 1,31 \quad \text{und} \quad \varkappa = 11,6$$

folgt.

¹⁴ Dieser Wert ist in guter Übereinstimmung mit dem Wert, der sich aus den mit anderen Methoden bestimmten Abständen für Li_2 ^{10, 15} und Cs_2 ¹⁶ mit Hilfe der Kombinationsregel $r_m = 1/2(r_{\text{Li}} + r_{\text{Cs}}) = 3,58 \text{ \AA}$ ergibt.

¹⁵ R. VALASCO, CH. OTTINGER u. R. N. ZARE, J. Chem. Phys. **51**, 5522 [1969].

¹⁶ R. H. DAVIES, E. A. MASON u. R. T. MUNN, Phys. Fluids **8**, 444 [1965].

¹⁷ Γ ergibt sich aus der für dieses Potential geltenden Beziehung $\Gamma = 1 - \varkappa/72$.

Entscheidend für die Genauigkeit von ε ist der Fehler in r_m und im Produkt $\varepsilon r_m a_1$. Da letzterer etwa $\pm 5\%$ beträgt, und die Unsicherheit von r_m in derselben Größenordnung liegt, sollte der Fehler in ε

$\pm 10\%$ nicht wesentlich übersteigen. Im Rahmen dieser Genauigkeit stimmt er mit dem Wert überein, der sich mit Hilfe der Kombinationsregel

$$\varepsilon_{\text{LiCs}} = (\varepsilon_{\text{Li}_2} \cdot \varepsilon_{\text{Cs}_2})^{1/2}$$

aus den spektroskopisch bestimmten Werten für Li_2^{15} und Cs_2^{18} zu $\varepsilon = 0,68 \text{ eV}$ ergibt.

Abbildung 3 zeigt das auf diese Weise bestimmte Potenzial in reduzierter Darstellung (durchgezogene Kurve). Die gestrichelte Kurve ist die Fortsetzung des Düren-Schlier-Potenzials für $x < 1$, die strichpunktuierte Kurve ist die Fortsetzung des Hulbert-Hirschfelder-Potenzials für $x > 1$.

Herrn Prof. Dr. Ch. SCHLIER sind wir für seine Unterstützung sowie wertvolle Diskussionen und Hinweise zu dieser Arbeit zu Dank verpflichtet. Ferner danken wir Herrn Dipl.-Phys. H. G. RAABE und Herrn Dr. R. DÜREN für die Überlassung von Computerprogrammen. Der experimentelle Teil der Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanziert, der wir ebenfalls an dieser Stelle unseren Dank aussprechen möchten. Die Berechnungen wurden im Rechenzentrum der Universität Freiburg durchgeführt.

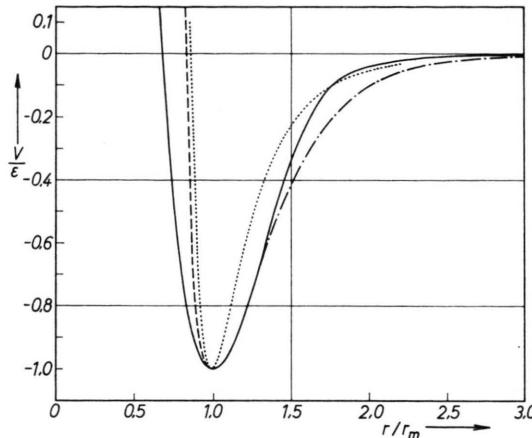


Abb. 3. Potenzialkurve für LiCs in reduzierten Einheiten (durchgezogene Kurve). Die gestrichelte Kurve ist die Fortsetzung des Düren-Schlier-Potenzials für $x < 1$, die strichpunktuierte Kurve ist die Fortsetzung des Hulbert-Hirschfelder-Potenzials für $x > 1$. Zum Vergleich ist ein Lennard-Jones (12, 6)-Potenzial punktiert eingezeichnet.

¹⁸ F. W. LOOMIS u. P. KUSCH, Phys. Rev. **46**, 292 [1934].