

gemeint) berechnen. Dies ist allerdings, wie wir sehen, nur über den Umweg der verallgemeinerten BVT möglich.

Für wertvolle Hinweise und Diskussionen danke ich den Herren Prof. Dr. K. Bleuler, Prof. Dr. D. Schütte und Dr. R. Petry.

- <sup>1</sup> M. Baranger, Cargèse Lectures in Theoretical Physics 1962, Hersg. M. Levy, W. A. Benjamin Inc., New York 1963.
- <sup>2</sup> G. Baumgärtner u. P. Schuck, Kernmodelle, Bibliographisches Institut, Mannheim 1968.
- <sup>3</sup> K. Dietrich, H. J. Mang, and J. Pradal, Phys. Rev. **B 135**, 22 [1964].
- <sup>4</sup> R. Beck, H. J. Mang, and P. Ring, Z. Physik **231**, 1 [1970].
- <sup>5</sup> K. Goeke, Preprint KFA Jülich 817-KP, Dez. 1971.
- <sup>6</sup> H. J. Mang and H. A. Weidenmüller, Ann. Rev. Nucl. Sci. **18**, 1 [1968].
- <sup>7</sup> H. G. Becker, Dissertation, Universität Bonn 1969, Inst. f. Theor. Kernphysik.

- <sup>8</sup> D. M. Brink, Proceedings of the International School Enrico Fermi, Course XXXVI, Academic Press, New York and London 1967.
- <sup>9</sup> M. Baranger, Phys. Rev. **130**, 1244 [1963].
- <sup>10</sup> C. Bloch and A. Messiah, Nucl. Phys. **39**, 95 [1962].
- <sup>11</sup> H. G. Becker, Z. Naturforsch. **28 a**, 332 [1973].
- <sup>12</sup> H. J. Lipkin, Anwendung von Lieschen Gruppen in der Physik, Bibliographisches Institut, Mannheim 1967.
- <sup>13</sup> H. Boerner, Darstellungen von Gruppen, Springer-Verlag, Berlin 1967, 2. Auflage.
- <sup>14</sup> K. Dietrich, H. J. Mang, and J. Pradal, Z. Physik **190**, 357 [1966].

## Theorie der Polaritonen in zweiachsigen endlichen Ionenkristallen

G. Borstel

Fachbereich Physik der Universität Münster, Lehrstuhl Prof. Dr. L. Merten

(Z. Naturforsch. **28 a**, 1055—1058 [1973]; received 20 March 1973)

*Theory of Polaritons in Biaxial Finite Ionic Crystals*

A macroscopic theory of polaritons and long optical phonons in biaxial finite ionic crystals is presented. For the case of a crystal plate it is shown that the dispersion of surface and bulk polaritons is determined by a system of nonlinear equations. These equations may be combined to an explicit dispersion formula only for propagation directions parallel to the principal axes of the dielectric tensor of the crystal.

### Einleitung

In letzter Zeit ist die Bestimmung der Dispersionskurven von Oberflächenpolaritonen in endlichen oder halbbunendlichen Ionenkristallen (z. B. GaP, NaCl, CaF<sub>2</sub>,  $\alpha$ -Quarz) durch verhinderte Totalreflexion<sup>1</sup> in zahlreichen experimentellen Arbeiten behandelt worden<sup>2–4</sup>. Die theoretische Berechnung solcher Dispersionskurven wurde für Kristalle kubischer Symmetrie mittels eines makroskopischen Ansatzes von Kliever und Fuchs<sup>5–7</sup> und von Englman und Ruppin<sup>8–10</sup>, mittels eines mikroskopischen Ansatzes von Lucas<sup>11</sup> und von Tong und Maradudin<sup>12</sup> durchgeführt. 1970/71 wurden die bisherigen Ergebnisse von Ruppin und Englman<sup>13</sup> sowie Maradudin u. a.<sup>14</sup> zusammengefaßt. Dabei zeigt sich, daß sich die für kubische Kristalle gewonnenen expliziten Dispersionsformeln nur für Hauptrichtungen einachsiger oder zweiachsiger Kristallsysteme verallgemeinern lassen. Eine makroskopische Theorie zur Berechnung der Dispersionskurven für beliebige Richtungen des Phononenwellenvektors scheint jedoch für zweiachsige endliche Kristalle bisher noch

zu fehlen<sup>15</sup>. Ziel dieser und folgender Arbeiten ist es daher, ausgehend von einem makroskopischen Ansatz, das Dispersionsverhalten in zweiachsigen endlichen Ionenkristallen allgemein zu untersuchen.

### Theorie

Zur Berechnung der Dispersionskurven von Polaritonen in endlichen Kristallen wählen wir die in Abb. 1 dargestellte Geometrie einer kristallinen

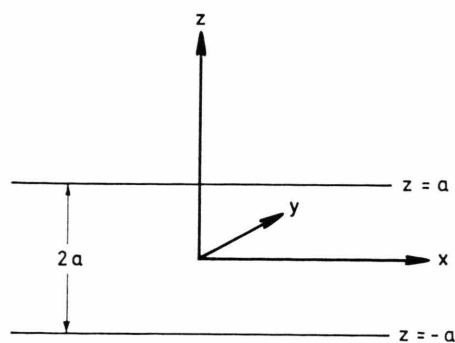


Abb. 1. Geometrie der Kristallplatte.



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.

Platte endlicher Dicke. Dabei steht die kristallographische  $z$ -Achse senkrecht auf der Oberfläche der Platte mit der Dicke  $2a$ . Der Kristall befinde sich im Vakuum, sei als ungeladen (Ladungsdichte  $\varrho=0$ ), unmagnetisch (Permeabilität  $\mu=1$ ) und als Nichtleiter (Stromdichte  $\mathbf{j}=0$ ) vorausgesetzt und durch einen frequenzabhängigen dielektrischen Diagonaltensor  $\varepsilon(\omega)$  mit den Hauptdiagonalelementen  $\varepsilon_x(\omega)$ ,  $\varepsilon_y(\omega)$ ,  $\varepsilon_z(\omega)$  charakterisiert. In diesem Fall lauten die Maxwell'schen Gleichungen für das System Kristall + Vakuum

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= 0, \\ \operatorname{div} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= 0, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= (-1/c) \partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) / \partial t, \\ \operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= (1/c) \partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) / \partial t.\end{aligned}\quad (1)$$

Hierbei ist die dielektrische Verschiebung  $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$  mit dem elektrischen Feld  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  nach  $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  verknüpft.  $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$  bedeutet das magnetische Feld,  $c$  die Vakuumlichtgeschwindigkeit.

Wählen wir für die einzelnen Feldgrößen  $\mathbf{X}(\mathbf{r}, t)$  eine Zeitabhängigkeit der Form  $e^{-i\omega t}$  mit der Kreisfrequenz  $\omega$  und beachten, daß wegen der Symmetrie der Anordnung die Feldgrößen periodische Funktio-

nen in  $x$ - und  $y$ -Richtung sein müssen, so läßt sich jede Feldgröße  $\mathbf{X}(\mathbf{r}, t)$  in der Form

$$\mathbf{X}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{X}(z) e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{-i\omega t}$$

mit einer zunächst noch unbekannten Funktion  $\mathbf{X}(z)$  ansetzen. Hierbei bezeichnet  $k_x$  die Komponente des Wellenvektors in  $x$ -Richtung,  $k_y$  die in  $y$ -Richtung. Da dieser Ansatz für die Feldgrößen, in die Gln. (1) eingesetzt, auf ein homogenes lineares Differentialgleichungssystem führt, lassen sich die unbekannten Funktionen  $\mathbf{X}(z)$  in der Form

$$\mathbf{X}(z) = \mathbf{X} e^{\alpha z}$$

mit einer noch zu bestimmenden Größe  $\alpha$  und einer im allgemeinen komplexen Amplitude  $\mathbf{X}$  schreiben.

Definieren wir einen dreidimensionalen Wellenvektor  $\mathbf{k}$  durch  $\mathbf{k} \equiv (k_x, k_y, -i\alpha)$ , so erhält damit  $\mathbf{X}(\mathbf{r}, t)$  die gewöhnliche Form

$$\mathbf{X}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{X} \exp\{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)\}.$$

Mit diesem Ansatz lassen sich nun die Maxwell'schen Gleichungen (1) zu

$$\mathbf{D} = (c^2/\omega^2) ((\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}) \mathbf{E} - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{k}) \quad (2)$$

zusammenfassen. Wegen  $\mathbf{D} = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}$  folgt somit ausführlich

$$\begin{bmatrix} k_y^2 - \alpha^2 - (\omega^2/c^2) \varepsilon_x(\omega) & -k_x k_y & i \alpha k_x \\ -k_x k_y & k_x^2 - \alpha^2 - (\omega^2/c^2) \varepsilon_y(\omega) & i \alpha k_y \\ i \alpha k_x & i \alpha k_y & k_x^2 + k_y^2 - (\omega^2/c^2) \varepsilon_z(\omega) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} = 0. \quad (3)$$

Wie in <sup>16</sup> gezeigt wurde, führt die Lösbarkeitsbedingung von Gl. (3) (Verschwinden der Determinante) auf eine verallgemeinerte Fresnelsche Normalengleichung der Form

$$F(k_x, k_y, k_z, \omega) \equiv \frac{\varepsilon_x(\omega) k_x^2}{n^2 - \varepsilon_x(\omega)} + \frac{\varepsilon_y(\omega) k_y^2}{n^2 - \varepsilon_y(\omega)} + \frac{\varepsilon_z(\omega) k_z^2}{n^2 - \varepsilon_z(\omega)} = 0, \quad (4)$$

wobei  $k_z^2 \equiv -\alpha^2$  und  $n^2 \equiv c^2 k^2 / \omega^2 = (c^2/\omega^2) (k_x^2 + k_y^2 - \alpha^2)$  gilt.

Zur Bestimmung der elektrischen Feldstärke  $\mathbf{E}$  aus Gl. (3) sei zunächst die Feldkomponente  $E_z$  beliebig fest gewählt. Aus der Cramerschen Regel folgt dann für  $E_x$  bzw.  $E_y$

$$\begin{aligned}E_x &= \frac{k_x}{-i\alpha} \frac{n^2 - \varepsilon_z(\omega)}{n^2 - \varepsilon_x(\omega)} E_z, \\ E_y &= \frac{k_y}{-i\alpha} \frac{n^2 - \varepsilon_z(\omega)}{n^2 - \varepsilon_y(\omega)} E_z.\end{aligned}$$

Bei Vorgabe der Feldkomponenten  $E_x$  bzw.  $E_y$  gelten diese Beziehungen analog. Die allgemeine Struktur des Eigenvektors  $\mathbf{E}$  ist daher

$$E_i = \frac{k_i n^2 - \varepsilon_j(\omega)}{k_j n^2 - \varepsilon_i(\omega)} E_j \quad \text{für } i, j = x, y, z. \quad (5)$$

Für  $\varepsilon(\omega) \neq \mathbf{I}$  ( $\mathbf{I}$ : Einheitstensor) sind somit bei Vorgabe einer Feldkomponente  $E_j$  die anderen Feldkomponenten nach Gl. (5) berechenbar. Für das Vakuum [ $\varepsilon(\omega) = \mathbf{I}$ ,  $n^2 = 1$ ] führt Gl. (5) auf eine Unbestimmtheit der Form  $0/0$ . Dies hat seine Ursache darin, daß im Vakuum zwei Feldkomponenten frei vorgegeben werden können, woraus sich die dritte nach  $\operatorname{div} \mathbf{E} = 0$  berechnet.

Da Gl. (4) quadratisch in  $\alpha$  ist, ist bei sonst gleichen  $k_x$ ,  $k_y$ ,  $\omega$  mit jeder Lösung  $\alpha$  auch  $-\alpha$  eine Lösung. Ist  $(E_x, E_y, E_z)$  der zu  $\alpha$  gehörige Eigenvektor, so folgt aus Gl. (3), daß  $(E_x, E_y, -E_z)$  ein Eigenvektor zu  $-\alpha$  ist. Im folgenden bezeichnen wir mit  $\alpha$  daher stets die positive Wurzel von Gleichung (4).

Da das System Kristallplatte + Vakuum nach Abb. 1 Reflektionssymmetrie an der Ebene  $z=0$  be-

sitzt, müssen die Lösungen des Gleichungssystems (1) bezügl. dieser Symmetrioperation entweder gerade oder ungerade Funktionen sein.

Für das Kristallinnere  $|z| < a$ , für das alle auftretenden Größen mit dem Index 1 versehen seien, setzen wir daher als allgemeine Lösung für das elektrische Feld an:

$$\begin{aligned} E_{1x}(z) &= E_{1x}(e^{z_1 z} \pm e^{-z_1 z}), \\ E_{1y}(z) &= E_{1y}(e^{z_1 z} \pm e^{-z_1 z}), \\ E_{1z}(z) &= E_{1z}(e^{z_1 z} \mp e^{-z_1 z}). \end{aligned} \quad (6)$$

Hierbei bezieht sich das obere Vorzeichen auf die Lösung mit gerader, das untere auf die Lösung mit ungerader Parität.

Die Größe  $\alpha_1$  ist nach Gl. (4) durch

$$F(k_x, k_y, \alpha_1, \omega) = 0 \quad (7)$$

bestimmt.

Im Vakuum  $|z| > a$ , für das alle auftretenden Größen mit dem Index 2 versehen seien, wählen wir vom Kristall her auslaufende Lösungen der Form

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_2(z) &= \mathbf{E}_2 e^{-z_2 z} \quad (z > a), \\ \mathbf{E}_2(z) &= \mathbf{E}_2 e^{z_2 z} \quad (z < -a). \end{aligned} \quad (8)$$

Die Größe  $\alpha_2$  ist hierbei ebenfalls durch Gl. (4) bestimmt. Wegen  $\varepsilon(\omega) = \mathbf{I}$  läßt sich Gl. (4) nach  $\alpha_2$  auflösen:

$$\alpha_2^2 = k_x^2 + k_y^2 - \omega^2/c^2. \quad (9)$$

Betrachtet man  $k_x$  und  $k_y$  als vorgegeben, so reichen die Gln. (7) und (9) noch nicht zur Bestimmung der drei Unbekannten  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $\omega$  aus. Die fehlende dritte Bestimmungsgleichung ergibt sich aus den Randbedingungen für die Feldgrößen. Diese lauten für  $z = \pm a$

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot [\mathbf{D}_1(z) - \mathbf{D}_2(z)] &= 0, \\ \hat{\mathbf{n}} \times [\mathbf{E}_1(z) - \mathbf{E}_2(z)] &= 0, \\ \mathbf{n} \cdot [\mathbf{H}_1(z) - \mathbf{H}_2(z)] &= 0, \\ \mathbf{n} \times [\mathbf{H}_1(z) - \mathbf{H}_2(z)] &= 0. \end{aligned}$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{n}$  einen Einheitsvektor normal zu der gegebenen Oberfläche, der vom Kristall ins Vakuum weist. Da der Kristall als unmagnetisch vorausgesetzt wurde, folgt aus der Gültigkeit der Randbedingungen für die elektrischen Feldgrößen die Gültigkeit der Randbedingungen für  $\mathbf{H}(z)$ . Es genügt daher, von den Gleichungen

$$\begin{aligned} \varepsilon_z(\omega) E_{1z}(z) &= E_{2z}(z), \quad E_{1x}(z) = E_{2x}(z), \\ E_{1y}(z) &= E_{2y}(z) \end{aligned} \quad (10)$$

für  $z = \pm a$  auszugehen.

Wählt man die Amplitude  $E_{1z}$  fest, errechnet daraus die Amplituden  $E_{1x}$  und  $E_{1y}$  nach Gl. (5), und verknüpft die Amplituden  $E_{2x}$ ,  $E_{2y}$ ,  $E_{2z}$  durch  $\text{div } \mathbf{E}_2 = 0$ , so erhält man aus den Bedingungen (10) für  $z = +a$

$$\begin{bmatrix} -e^{-z_2 a} & 0 & 0 & k_x \frac{n^2 - \varepsilon_z(\omega)}{n^2 - \varepsilon_x(\omega)} (e^{z_1 a} \pm e^{-z_1 a}) \\ 0 & -e^{-z_2 a} & 0 & k_y \frac{n^2 - \varepsilon_z(\omega)}{n^2 - \varepsilon_y(\omega)} (e^{z_1 a} \pm e^{-z_1 a}) \\ 0 & 0 & -e^{-z_2 a} & \varepsilon_z(\omega) (e^{z_1 a} \mp e^{-z_1 a}) \\ k_x e^{-\alpha_2 a} & k_y e^{-\alpha_2 a} & i z_2 e^{-\alpha_2 a} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{2x} \\ E_{2y} \\ E_{2z} \\ E_{1z} \end{bmatrix} = 0.$$

Als Lösungsbedingung dieses Systems ergibt sich

$$\frac{k_x^2}{\alpha_1} \frac{n^2 - \varepsilon_z(\omega)}{n^2 - \varepsilon_x(\omega)} + \frac{k_y^2}{\alpha_1} \frac{n^2 - \varepsilon_z(\omega)}{n^2 - \varepsilon_y(\omega)} + \alpha_2 \varepsilon_z(\omega) \left\{ \frac{\tanh \alpha_1 a}{\coth \alpha_1 a} \right\} = 0. \quad (11)$$

Ersetzt man  $z = +a$  durch  $z = -a$ , so folgt die gleiche Bedingung. Hierbei hat die  $\tanh$ -Lösung gerade, die  $\coth$ -Lösung ungerade Parität.

Durch das transzendente Gleichungssystem (7), (9), (11) ist somit das Problem der Berechnung von Dispersionskurven von Polaritonen in zweiachsigen Kristallplatten vollständig gelöst. Bei Spezialisierung der Formeln auf Kristalle kubischer

Symmetrie lassen sich die Gln. (7) und (11) in explizite Formen bringen und mit Gl. (9) zu den von Kliewer und Fuchs angegebenen Dispersionsrelationen zusammenfassen.

Herrn Professor Dr. L. Merten danke ich für anregende Diskussionen. Die Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanziell unterstützt.

<sup>1</sup> A. Otto, Z. Phys. **216**, 398 [1968].

<sup>2</sup> N. Marshall u. B. Fischer, Phys. Rev. Lett. **28**, 811 [1972].

<sup>3</sup> V. V. Bryksin, Yu. M. Gerbshtein u. D. N. Mirlin, Sov. Phys.-Solid State **14**, 453 [1972].

- <sup>4</sup> H. J. Falge u. A. Otto, Phys. Stat. Sol. (b) **56**, 523 [1973].  
<sup>5</sup> K. L. Kliewer u. R. Fuchs, Phys. Rev. **144**, 495 [1966].  
<sup>6</sup> K. L. Kliewer u. R. Fuchs, Phys. Rev. **150**, 573 [1966].  
<sup>7</sup> R. Fuchs u. K. L. Kliewer, J. Opt. Soc. Amer. **58**, 319 [1968].  
<sup>8</sup> R. Englman u. R. Ruppın, J. Phys. C **1**, 614 [1968].  
<sup>9</sup> R. Ruppın u. R. Englman, J. Phys. C **1**, 630 [1968].  
<sup>10</sup> R. Englman u. R. Ruppın, J. Phys. C **2**, 1515 [1968].  
<sup>11</sup> A. A. Lucas, Phys. Rev. **162**, 801 [1967].  
<sup>12</sup> S. Y. Tong u. A. A. Maradudin, Phys. Rev. **181**, 1318 [1969].  
<sup>13</sup> R. Ruppın u. R. Englman, Rep. Prog. Phys. **33**, 149 [1970].  
<sup>14</sup> A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G. H. Weiss u. I. P. Ipatova, Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation, Academic Press, New York 1971, Kapitel IX.  
<sup>15</sup> Halbunendliche ein- und zweiachsige Kristalle wurden kürzlich von V. N. Lyubimov u. D. G. Sunnikov (Sov. Phys.-Solid State **14**, 575 [1972]) sowie von A. Hartstein, E. Burstein, u. a. (Surf. Sci. **34**, 81 [1973]) theoretisch behandelt.  
<sup>16</sup> L. Merten, Z. Naturforsch. **22a**, 359 [1967].

## Hyperfeinstruktur von KJ

E. Tiemann, H. El Ali, J. Hoeft und T. Törring

Institut für Molekülphysik der Freien Universität Berlin

(Z. Naturforsch. **28a**, 1058—1062 [1973]; eingegangen am 24. März 1973)

### Hyperfine Structure of KI

The quadrupole hyperfine structure of  $^{39}\text{K}^{127}\text{I}$  was measured on the rotational transition  $J=1 \rightarrow 2$  at 7.2 GHz. Observations in various vibrational states resulted in the following quadrupole coupling constants:  $(eq_QQ)^{39}\text{K} = -4.12(10)$  MHz,  $(eq_QQ)^{127}\text{I} = (-85.32 - 2.93(v+1/2) \pm 0.12)$  MHz.

In letzter Zeit haben wir über Hyperfeinstrukturmessungen an den Rotationsspektren von  $\text{CsCl}^1$ ,  $\text{CsBr}^2$  und  $\text{CsJ}^3$  berichtet. Mit der vorliegenden Arbeit wurden diese systematischen Untersuchungen an schweren Alkalihalogeniden fortgesetzt. Ziel der Arbeiten ist ein möglichst vollständiger Überblick über die Variation der molekularen Paramater innerhalb dieser Gruppe, um die chemische Bindung eingehender diskutieren zu können. Bekanntlich konnten bisherige Ergebnisse am elektronischen Grundzustand, wie elektrisches Dipolmoment und niedrigste Potentialkonstanten, mit dem klassischen Ionenmodell von Rittner<sup>4</sup> interpretiert werden. Die Quadrupolkopplungskonstanten lassen sich mit diesem Modell jedoch nicht deuten. Unsere Hyperfeinstrukturmessungen sollen dazu beitragen, neue Modellansätze zu finden.

Um die Größe der Quadrupol-HFS im KJ abschätzen zu können, ist in Tab. 1 ein Überblick über die bisher bekannten Kopplungskonstanten des  $^{39}\text{K}$  und  $^{127}\text{I}$  angegeben. Danach ist für KJ eine K-Konstante  $|eq_QQ| < 5$  MHz und eine J-Konstante  $|eq_QQ| < 100$  MHz zu erwarten. Der in<sup>5</sup> angegebene Wert wurde aus einem unvollständig aufgelösten Spektrum ermittelt. Er ist deshalb als Schätzwert anzusehen. Bei den Rotationsspektren der Alkalihaloge-

nide beobachtet man typische Linienbreiten von 400 kHz. Deswegen erreicht man eine hinreichende Auflösung der zweifachen HFS nur bei den niedrigsten Rotationsübergängen. Bei den alten Messungen wurde als niedrigster Übergang  $J=4 \rightarrow 5$  bei 18 GHz beobachtet. Außerdem liegen Messungen im Bereich der mm-Wellen am KJ von Rusk und Gordy<sup>6</sup> vor. Diese lieferten sehr genaue Rotationskonstanten.

### I. Experimentelles

Die Messungen wurden mit einem konventionellen 100 kHz-Stark-Effekt-Spektrometer ausgeführt. Als heizbare Absorptionszelle wurde der Typ III (rechteckiger Querschnitt) verwendet, wie er in<sup>7</sup> beschrieben ist. Die meisten Linien wurden wegen ihrer geringen Intensität mit einem „Signal Averager“ registriert. Dabei ergaben sich Registrierzeiten bis zu 30 Minuten. Das Spektrum des Rotationsüberganges  $J=1 \rightarrow 2$  wurde bei Temperaturen um  $540^\circ\text{C}$  bis zum Schwingungszustand von  $v=3$  beobachtet. Typische Linienbreiten bei vollständig aufgelösten Linien waren etwa 300 kHz. Einen Ausschnitt des Spektrums zeigt Abbildung 1. Vor jeder Messung wurde die Ausgangssubstanz unter Vakuum bei Temperaturen von  $570^\circ\text{C}$  destilliert. Anschließend wurde das Destillat in die Absorptionszelle eingefüllt und bei Temperaturen um  $400^\circ\text{C}$  mehrere Tage unter Vakuum entgast. Dadurch wurden Substanz