

- ¹ J. Hoeft, E. Tiemann u. T. Törring, Z. Naturforsch. **27 a**, 1516 [1972].
² J. Hoeft, E. Tiemann u. T. Törring, Z. Naturforsch. **27 a**, 702 [1972].
³ J. Hoeft, E. Tiemann u. T. Törring, Z. Naturforsch. **27 a**, 1017 [1972].
⁴ E. S. Rittner, J. Chem. Phys. **19**, 1030 [1951].
⁵ A. Honig, M. Mandel, M. L. Stitch u. C. H. Townes, Phys. Rev. **96**, 629 [1954].
⁶ J. R. Rusk u. W. Gordy, Phys. Rev. **127**, 817 [1962].
⁷ J. Hoeft, F. J. Lovas, E. Tiemann u. T. Törring, Z. Angew. Phys. **31**, 265 [1971].
⁸ B. Schenk, E. Tiemann u. J. Hoeft, Z. Naturforsch. **25 a**, 1827 [1970].

Hyperfeinstruktur von AlJ

T. Törring, E. Tiemann und J. Hoeft

Institut für Molekülphysik der Freien Universität Berlin

(Z. Naturforsch. **28 a**, 1062–1066 [1973]; eingegangen am 30. März 1973)

Hyperfine Structure of AlI

The quadrupole hyperfine structure of $^{27}\text{Al}^{127}\text{I}$ was measured on the rotational transition $J=1 \rightarrow 2$ and 14 GHz. Observations in various vibrational states resulted in the following quadrupole coupling constants:

$$\begin{aligned} eq_0 Q(^{27}\text{Al}) &= -25.50(10) \text{ MHz}, \\ eq_v Q(^{127}\text{I}) &= -307.407 - 4.315(v + 1/2) \pm 0.100 \text{ MHz}. \end{aligned}$$

The magnetic spin-rotation-interaction of the iodine nucleus was included in the calculation. We obtained as coupling constant:

$$c_I(^{127}\text{I}) = +13.3(10) \text{ kHz}.$$

Die Gruppe der zweiatomigen III/VII-Verbindungen wird häufig mit der Gruppe der Alkalihalogenide (I/VII) verglichen. Deren experimentelle Daten lassen sich im Modell der ionischen Bindung gut verstehen. Die Kopplungskonstante der Quadrupolhyperfeinstruktur enthält den elektrischen Feldgradienten der Elektronenhülle am entsprechenden Kernort. Damit ergibt sich ein unmittelbarer Zusammenhang zwischen Quadrupol-HFS und Elektronenverteilung beziehungsweise chemischer Bindung im Molekül. Mit Hilfe des Townes-Dailey-Modells¹ versucht man, durch Vergleich der molekularen mit den entsprechenden atomaren Konstanten auf den Bindungstyp, ionisch oder kovalent, zu schließen. In der Gruppe der III/VII-Verbindungen liegen Messungen an den schweren Molekülen vor. Die dabei gewonnenen Molekülkonstanten, wie Quadrupolkopplungskonstanten und auch elektrische Dipolmomente, weisen nicht eindeutig auf eine überwiegend ionische Bindung hin. Die systematische Variation der molekularen Parameter deuten ebenso auf eine enge Verwandtschaft zu den isoelektronischen IV/VI-Verbindungen hin².

Bei den Aluminium-Halogeniden sind HFS-Analy-

sen von AlF³ und AlCl⁴ bekannt. Wir berichten in dieser Arbeit über die HFS des AlJ. Aus dem mm-Wellen-Spektrum des AlJ⁵ sind sehr genaue Rotationskonstanten bekannt. In⁵ wird auch ein Wert für die ^{127}J -Quadrupolkopplungskonstante angegeben, den die Autoren aus der unvollständig aufgelösten HFS eines hohen Rotationsüberganges ermittelten. Dabei wurde die Al-HFS vernachlässigt.

I. Experimentelles

Die Messungen wurden mit einem konventionellen 100 kHz-Stark-Effekt-Spektrometer durchgeführt. Die elektronische Anordnung wurde durch einen „Signal Averager“ und eine Phasensynchronisation der Strahlungsquelle erweitert. Als heizbare Absorptionszelle kam der Typ III, der in⁶ beschrieben ist, zur Anwendung. AlJ wurde bei der Messung unmittelbar in der Zelle bei Temperaturen um 640 °C aus den Elementen dargestellt. Dazu wurden die Zellenhälften mit einem Aluminiumbronze-Anstrich versehen und gasförmiges Jod durch die Zelle gepumpt. An den Enden des heißen Bereichs schlug sich elementares Aluminium nieder. In den kälteren Zonen entstanden dicke Niederschläge von AlJ₃. Hinweise auf festes AlJ ergaben sich nicht. Über die Effektivität der Erzeugung von AlJ gegenüber AlJ₃ lassen sich keine Aussagen machen.

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. T. Törring, Institut für Molekülphysik der Freien Universität Berlin, D-1000 Berlin-33, Boltzmannstraße 20.



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.

Tab. 1. Spektrum des Rotationsübergangs $J=1 \rightarrow 2$ von $^{27}\text{Al}^{127}\text{J}$. Für $v=0$ sind alle Linien mit $I > 0,1\%$ aufgeführt, für $v > 0$ alle Linien mit $I > 0,5\%$ außer im Fall überlagernder Linien. Die Meßgenauigkeit beträgt durchweg ± 30 kHz; bei Linien mit $I < 1\% \pm 50$ kHz. F_1 ist nur eine genäherte Quantenzahl. Die Zustände $J=2, F_1=3/2$ und $J=2, F_1=9/2$ sind in 1. Ordnung entartet. Die angegebene F_1 -Zahl bezeichnet den Hauptbeitrag im Eigenvektor des betreffenden Zustandes.

$F_1 \rightarrow F_1'$	$F \rightarrow F'$	$I [\%]$	$\nu_{\text{ger.}} [\text{MHz}]$	$\nu_{\text{gem.}} [\text{MHz}]$	$F_1 \rightarrow F_1'$	$F \rightarrow F'$	$I [\%]$	$\nu_{\text{ger.}} [\text{MHz}]$	$\nu_{\text{gem.}} [\text{MHz}]$	
Schwingungszustand $v = 0$					$5/2 \rightarrow 7/2$	$4 \rightarrow 5$	2,98	14090,048	14090,082	
$3/2 \rightarrow 5/2$	$1 \rightarrow 0$	0,17	14012,841	14014,367	$4 \rightarrow 4$	0,88	14090,168			
	$1 \rightarrow 1$	0,36	14013,628		$3 \rightarrow 4$	2,39	14090,574	14090,589		
	$2 \rightarrow 1$	0,15	14014,328		$3 \rightarrow 3$	0,72	14090,672			
	$4 \rightarrow 5$	1,83	14014,364		$2 \rightarrow 3$	1,77	14092,855	14092,839		
	$1 \rightarrow 2$	0,25	14014,672		$2 \rightarrow 2$	0,60	14093,149			
	$2 \rightarrow 2$	0,50	14015,372		$5 \rightarrow 5$	1,04	14093,644	14093,626		
	$4 \rightarrow 4$	0,41	14015,624		$5 \rightarrow 6$	4,56	14094,435	14094,452		
	$2 \rightarrow 3$	0,62	14016,120		$1 \rightarrow 2$	1,13	14095,368	14095,346		
	$3 \rightarrow 3$	0,53	14016,414		$5/2 \rightarrow 7/2$	$1 \rightarrow 1$	0,44	14095,890	14095,820	
	$3 \rightarrow 4$	1,12	14016,472			$0 \rightarrow 1$	0,57	14097,194		
$7/2 \rightarrow 7/2$	$1 \rightarrow 2$	0,23	14024,770	14026,564	$3/2 \rightarrow 1/2$	$1 \rightarrow 2$	0,91	14098,572	14098,675	
	$1 \rightarrow 1$	0,44	14025,292			$4 \rightarrow 3$	2,56	14098,717		
	$6 \rightarrow 5$	0,32	14025,771			$2 \rightarrow 2$	1,06	14099,272	14099,294	
	$2 \rightarrow 3$	0,34	14025,982			$2 \rightarrow 3$	0,31	14099,272		
	$2 \rightarrow 2$	0,51	14026,275			$3 \rightarrow 2$	0,80	14099,565	14099,570	
	$6 \rightarrow 6$	2,44	14026,562			$3 \rightarrow 3$	0,98	14099,566		
	$2 \rightarrow 1$	0,19	14026,798		$5/2 \rightarrow 5/2$	$4 \rightarrow 5$	0,95	14105,827	14105,820	
	$3 \rightarrow 4$	0,38	14027,763			$3 \rightarrow 2$	0,79	14106,685		
	$3 \rightarrow 3$	0,70	14027,860			$4 \rightarrow 3$	0,79	14107,028	14107,078	
	$7/2 \rightarrow 7/2$	$3 \rightarrow 2$	0,28			14028,154	$4 \rightarrow 4$	1,68		14107,086
$5 \rightarrow 5$		1,40	14028,276	$3 \rightarrow 3$	1,00	14107,434	14107,462			
$5 \rightarrow 4$		0,35	14028,396	$3 \rightarrow 4$	0,76	14107,492				
$4 \rightarrow 5$		0,36	14028,900	$2 \rightarrow 1$	0,64	14107,825	14109,450			
$4 \rightarrow 4$		0,98	14029,020	$2 \rightarrow 2$	0,47	14108,869				
$5 \rightarrow 6$		0,23	14029,068	$1 \rightarrow 0$	0,34	14109,257				
$4 \rightarrow 3$		0,33	14029,117	$5 \rightarrow 5$	2,75	14109,422				
$7/2 \rightarrow 5/2$		$2 \rightarrow 1$	0,13	14040,952	$2 \rightarrow 3$	0,57		14109,618		
	$6 \rightarrow 5$	0,34	14041,549	$1 \rightarrow 1$	0,12	14110,044		14110,682		
	$3 \rightarrow 2$	0,20	14043,874	$5 \rightarrow 4$	0,60	14110,682				
	$5 \rightarrow 5$	0,23	14044,054	$1 \rightarrow 2$	0,43	14111,088	14111,349			
	$5 \rightarrow 4$	0,27	14045,314	$0 \rightarrow 1$	0,25	14111,349				
	$4 \rightarrow 3$	0,24	14045,880	$5/2 \rightarrow 3/2$	$4 \rightarrow 4$	0,24	14149,447	14152,329		
	$4 \rightarrow 4$	0,15	14045,938		$2 \rightarrow 1$	0,19	14150,360			
	$3/2 \rightarrow 3/2$	$1 \rightarrow 1$	0,33		14056,163	$3 \rightarrow 2$	0,44		14151,058	
$2 \rightarrow 1$		0,82	14056,862		$4 \rightarrow 3$	0,75	14152,343			
$4 \rightarrow 4$		1,75	14057,985	$1 \rightarrow 1$	0,23	14152,579	14152,749			
$4 \rightarrow 4$		0,81	14058,110	$3 \rightarrow 3$	0,30	14152,749				
$3/2 \rightarrow 9/2$	$3 \rightarrow 4$	0,90	14058,833	$5 \rightarrow 4$	0,88	14153,043	14153,075			
	$1 \rightarrow 2$	0,75	14059,044	$5/2 \rightarrow 9/2$	$5 \rightarrow 4$	0,32			14153,168	
	$3 \rightarrow 2$	1,18	14060,037	$5/2 \rightarrow 3/2$	$2 \rightarrow 2$	0,29		14153,241		
	$4 \rightarrow 3$	0,83	14060,881	$0 \rightarrow 1$	0,11	14153,883				
	$2 \rightarrow 3$	1,09	14061,435	Schwingungszustand $v = 1$						
	$3/2 \rightarrow 3/2$	$3 \rightarrow 3$	0,80	14061,729	$3/2 \rightarrow 5/2$	$2 \rightarrow 1$		0,11	13946,698	13946,737
$7/2 \rightarrow 9/2$		$6 \rightarrow 6$	0,57	14084,618		$4 \rightarrow 5$	1,44	13946,742		
		$5 \rightarrow 5$	0,99	14086,527		$3 \rightarrow 3$	0,41	13948,781	13948,811	
		$7/2 \rightarrow 3/2$	$3 \rightarrow 4$	0,75		14087,043	$3 \rightarrow 4$	0,88		
	$5 \rightarrow 6$		6,65	14087,123	$7/2 \rightarrow 7/2$	$2 \rightarrow 2$	0,40	13958,817	13959,091	
$4 \rightarrow 5$	5,00		14087,150	$6 \rightarrow 6$		1,91	13959,096			
$3 \rightarrow 4$	2,96		14087,167	$2 \rightarrow 1$		0,15	13959,334			
$2 \rightarrow 3$	2,69	14087,363	$3 \rightarrow 3$	0,55		13960,386				
$7/2 \rightarrow 9/2$	$6 \rightarrow 7$	8,33	14087,927	$7/2 \rightarrow 7/2$	$5 \rightarrow 5$	1,10	13960,803	13961,552		
	$1 \rightarrow 2$	2,04	14088,011		$4 \rightarrow 5$	0,28	13961,413			
	$7/2 \rightarrow 3/2$	$4 \rightarrow 4$	0,40		14088,299	$4 \rightarrow 4$	0,77		13961,533	
		$4 \rightarrow 4$	0,75		14088,424	$5 \rightarrow 6$	0,18		13961,589	
$3 \rightarrow 3$		1,03	14089,242	$4 \rightarrow 3$	0,26	13961,633				
$2 \rightarrow 2$		0,67	14089,517	$3/2 \rightarrow 3/2$	$2 \rightarrow 1$	0,64	13989,850	13991,002		
$7/2 \rightarrow 9/2$	14089,238				$4 \rightarrow 4$	1,38	13990,962			
	$3/2 \rightarrow 9/2$	$4 \rightarrow 4$	0,63	13991,134						

$F_1 \rightarrow F_1'$	$F \rightarrow F'$	I [%]	$\nu_{\text{ger.}}$ [MHz]	$\nu_{\text{gem.}}$ [MHz]	$F_1 \rightarrow F_1'$	$F \rightarrow F'$	I [%]	$\nu_{\text{ger.}}$ [MHz]	$\nu_{\text{gem.}}$ [MHz]			
$3/2 \rightarrow 3/2$	$3 \rightarrow 4$	0,71	13991,805	13992,997	$7/2 \rightarrow 9/2$	$5 \rightarrow 5$	0,61	13953,501	13954,100			
	$1 \rightarrow 2$	0,59	13992,014			$5 \rightarrow 6$	4,11	13954,096				
	$3 \rightarrow 2$	0,93	13993,009			$4 \rightarrow 5$	3,09	13954,112				
	$4 \rightarrow 3$	0,65	13993,850			$3 \rightarrow 4$	1,83	13954,133				
	$2 \rightarrow 3$	0,85	13994,397			$2 \rightarrow 3$	1,66	13954,332				
	$3 \rightarrow 3$	0,63	13994,693			$6 \rightarrow 7$	5,15	13954,898				
$7/2 \rightarrow 9/2$	$5 \rightarrow 5$	0,78	14019,096	14020,510	$5/2 \rightarrow 7/2$	$1 \rightarrow 2$	1,26	13954,982	13954,930			
	$3 \rightarrow 4$	0,59	14020,370			$3 \rightarrow 3$	0,64	13956,200				
	$5 \rightarrow 6$	5,23	14020,499			$4 \rightarrow 5$	1,84	13957,175				
	$4 \rightarrow 5$	3,93	14020,516			$4 \rightarrow 4$	0,54	13957,291				
	$3 \rightarrow 4$	2,33	14020,543			$3 \rightarrow 4$	1,47	13957,695				
	$2 \rightarrow 3$	2,11	14020,734			$3 \rightarrow 3$	0,44	13957,797				
	$6 \rightarrow 7$	6,55	14021,297			$2 \rightarrow 3$	1,09	13959,976				
	$1 \rightarrow 2$	1,60	14021,381			$5 \rightarrow 5$	0,64	13960,763				
	$4 \rightarrow 4$	0,59	14021,790			$5 \rightarrow 6$	2,82	13961,549				
	$7/2 \rightarrow 9/2$	$3 \rightarrow 3$	0,81			14022,596	$3/2 \rightarrow 1/2$	$1 \rightarrow 2$		0,56	13965,870	13965,978
$2 \rightarrow 2$		0,53	14022,876	$4 \rightarrow 3$	1,58	13966,022						
$5/2 \rightarrow 7/2$	$4 \rightarrow 5$	2,34	14023,509	14023,541	$5/2 \rightarrow 5/2$	$2 \rightarrow 3$	0,19	13966,571	13966,558			
	$4 \rightarrow 4$	0,69	14023,629			$2 \rightarrow 2$	0,65	13966,571				
	$3 \rightarrow 4$	1,88	14024,032			$3 \rightarrow 3$	0,61	13966,869				
	$3 \rightarrow 3$	0,56	14024,133			$3 \rightarrow 2$	0,49	13966,869				
	$2 \rightarrow 3$	1,39	14026,302			14026,302	$4 \rightarrow 5$	0,59		13973,381		
	$5 \rightarrow 5$	0,81	14027,083			14027,096	$4 \rightarrow 3$	0,49		13974,585		
	$5 \rightarrow 6$	3,58	14027,869			14027,879	$4 \rightarrow 4$	1,04		13974,645		
	$1 \rightarrow 2$	0,89	14028,804			$3 \rightarrow 3$	0,62	13974,989				
$3/2 \rightarrow 1/2$	$1 \rightarrow 2$	0,72	14032,098	14032,229	Schwingungszustand $v = 3$							
	$4 \rightarrow 3$	2,02	14032,247		$3/2 \rightarrow 5/2$	$4 \rightarrow 5$	0,89	13812,215				
	$2 \rightarrow 3$	0,24	14032,794		$7/2 \rightarrow 7/2$	$3 \rightarrow 4$	0,54	13814,305				
	$2 \rightarrow 2$	0,83	14032,796			$6 \rightarrow 6$	1,18	13824,917				
	$3 \rightarrow 3$	0,77	14033,090			$5 \rightarrow 5$	0,68	13826,620				
	$3 \rightarrow 2$	0,63	14033,092			$4 \rightarrow 4$	0,82	13857,681				
$5/2 \rightarrow 5/2$	$4 \rightarrow 5$	0,75	14039,494	14039,509		$3/2 \rightarrow 3/2$	$4 \rightarrow 4$	0,42	13857,809	13857,715		
	$3 \rightarrow 2$	0,62	14040,345		$3/2 \rightarrow 9/2$	$3 \rightarrow 2$	0,57	13859,709				
	$4 \rightarrow 3$	0,62	14040,690		$7/2 \rightarrow 9/2$	$2 \rightarrow 3$	0,53	13861,077				
	$4 \rightarrow 4$	1,32	14040,749			$5 \rightarrow 6$	3,23	13887,960				
	$3 \rightarrow 3$	0,79	14041,093			$4 \rightarrow 5$	2,43	13887,967				
	$3 \rightarrow 4$	0,59	14041,152			$3 \rightarrow 4$	1,39	13887,989				
	$2 \rightarrow 1$	0,50	14041,476			$2 \rightarrow 3$	1,31	13888,190				
	$5/2 \rightarrow 3/2$	$1 \rightarrow 0$	0,27		14042,906	14043,075	$7/2 \rightarrow 9/2$	$6 \rightarrow 7$	4,05		13888,751	13888,761
		$5 \rightarrow 5$	2,16		14043,068			$1 \rightarrow 2$	0,99		13888,833	
		$2 \rightarrow 3$	0,45		14043,263			$3 \rightarrow 3$	0,50		13890,029	
Schwingungszustand $v = 2$												
$3/2 \rightarrow 5/2$	$4 \rightarrow 5$	1,13	13879,343	13879,340	$5/2 \rightarrow 7/2$	$4 \rightarrow 5$	1,46	13891,150	13891,157			
	$3 \rightarrow 3$	0,33	13881,394			$4 \rightarrow 4$	0,42	13891,260				
	$3 \rightarrow 4$	0,69	13881,454			$3 \rightarrow 4$	1,16	13891,657				
$7/2 \rightarrow 7/2$	$6 \rightarrow 6$	1,51	13891,874	13891,859	$3/2 \rightarrow 1/2$	$2 \rightarrow 3$	0,85	13893,910	13891,629			
	$5 \rightarrow 5$	0,86	13893,592			$5 \rightarrow 6$	2,22	13895,460				
	$4 \rightarrow 4$	0,60	13894,318			$1 \rightarrow 2$	0,55	13896,395				
$3/2 \rightarrow 3/2$	$2 \rightarrow 1$	0,51	13923,061	13924,206	$5/2 \rightarrow 5/2$	$4 \rightarrow 4$	0,82	13908,821	13908,867			
	$4 \rightarrow 4$	1,08	13924,183			$5 \rightarrow 5$	1,35	13911,105				
$3/2 \rightarrow 9/2$	$4 \rightarrow 4$	0,50	13924,321	$3/2 \rightarrow 3/2$	$2 \rightarrow 3$	0,15	13900,603	13900,026				
$3/2 \rightarrow 3/2$	$3 \rightarrow 4$	0,56	13925,029		$2 \rightarrow 2$	0,51	13900,603					
	$3 \rightarrow 2$	0,73	13926,236		$3 \rightarrow 3$	0,48	13900,901					
	$4 \rightarrow 3$	0,51	13927,079		$3 \rightarrow 2$	0,38	13900,901					
	$2 \rightarrow 3$	0,67	13927,627		$5/2 \rightarrow 5/2$	$4 \rightarrow 4$	0,82		13908,821	13908,867		
	$3 \rightarrow 3$	0,50	13927,925			$5 \rightarrow 5$	1,35		13911,105		13911,063	

II. Messungen und Auswertung

Die Messungen wurden am Rotationsübergang $J=1 \rightarrow 2$ im Frequenzbereich um 14 GHz in den Schwingungszuständen $v=0$ bis $v=3$ durchgeführt. Dabei ergaben sich volle Halbwertsbreiten von 250 bis 300 kHz. Zur Einstellung eines optimalen Verhältnisses von Linienbreite und Intensität wurde die Durchflußmenge des Jod mit einem Dosierventil geregelt.

Die Deutung des Spektrums wird durch das zu erwartende große Verhältnis $e q Q_J : e q Q_{Al} \approx 10 : 1$ erleichtert. Dazu gehen wir von dem folgenden Kopplungsfall aus: Der Rotationsdrehimpuls \mathbf{J} koppelt mit dem Kernspin \mathbf{I}_1 des Jods zu \mathbf{F}_1 und \mathbf{F}_1 koppelt mit dem Kernspin \mathbf{I}_2 des Aluminiums zum Gesamtdrehimpuls \mathbf{F} . F_1 ist damit noch als gute Quantenzahl anzusprechen, und wir finden im Spektrum Liniengruppen, die jeweils einem Übergang $F_1 \rightarrow F_1'$ zuzuordnen sind. Jede Gruppe spaltet entsprechend der Aluminium-HFS weiter auf.

Die gemessenen Frequenzen sind nach Schwingungszuständen geordnet in Tab. 1 aufgeführt. Zur Klassifizierung benutzen wir die noch guten Quantenzahlen J und F_1 und die exakte Quantenzahl F . Die Anpaßrechnung wird nach der in ⁷ genauer ausgeführten Methode vorgenommen. Dabei werden bei der Aufstellung der Energiematrizen die Beimischungen höherer Rotationszustände bis $J=6$ berücksichtigt. Außerdem erweist es sich als notwendig, die magnetische Spin-Rotations-Kopplung c_1 für den Jodkern zu berücksichtigen.

Bei den nicht voll aufgelösten Liniengruppen sind in Tab. 1 die Frequenzen der Gruppenmaxima angegeben. Zur Anpaßrechnung wurden diese Frequenzen auf einen Einzelübergang umgerechnet.

Dabei wurde eine Überlagerung der einzelnen Lorentz-Linien zu dieser unaufgelösten Gruppe mit vorgegebener Linienbreite von 280 kHz berechnet. Die dazu notwendigen relativen Intensitäten der Linien sind in Tab. 1 angegeben. Die Summe aller Linienintensitäten zum Schwingungszustand $v=0$ ergibt 100%; Linien mit Intensitäten unter 0,1%

sind in Tab. 1 nicht aufgeführt. Die Intensitäten der angeregten v -Zustände wurden durch Multiplikation der Intensitäten zu $v=0$ mit dem entspre-

Tab. 3. Vergleich der Rotationskonstanten B_v mit Werten anderer Autoren.

v	diese Arbeit	Wyse/Gordy ⁵
0	3520,1867 (20)	3520,1876 (7)
1	3503,5048 (20)	3503,5042 (10)
2	3486,8824 (25)	3486,8829 (13)
3	3470,3245 (30)	3470,3228 (16)

chenden Boltzmann-Faktor der Besetzung der Schwingungszustände für eine mittlere Meßtemperatur von 640 °C berechnet. Die Anpaßrechnung wurde für jeden Schwingungszustand einzeln durchgeführt. Die daraus ermittelten vier Molekülkonstanten $e q Q_{Al}$, $e q Q_J$, c_1 und $B_v + 2 Y_{02}(J+1)^2$ sind in Tab. 2 enthalten. Die in Tab. 1 eingetragenen berechneten Linienfrequenzen zeigen die Konsistenz der Messungen.

Entnimmt man der Arbeit ⁵ die Zentrifugalkorrektur Y_{02} , so kann man die Rotationskonstanten B_v berechnen. Diese Werte sind mit denen aus dem mm-Wellen-Spektrum des AlJ ⁵ gut verträglich; die Gegenüberstellung geschieht in Tabelle 3.

Die Schwingungsabhängigkeit der Quadrupolkopplungskonstante konnte nur für Jod eindeutig ermittelt werden. Zwischen $e q_v Q$ und v ergibt sich im Rahmen unserer Meßgenauigkeit ein linearer Zusammenhang; die übliche Entwicklung nach $(v+1/2)$ ist dann:

$$e q_v Q(^{127}\text{J}) = -307,407 - 4,315(v+1/2) \pm 0,100 \text{ MHz.}$$

Bei $e q Q_{Al}$ deutet sich eine Schwingungsabhängigkeit an. Sie wird in der Größe von +100 kHz bei Variation von v nach $v+1$ liegen. Dieser Wert ist verträglich bezüglich Vorzeichen und Betrag mit den bisher in dieser Molekülklasse gemessenen v -Abhängigkeiten von Metallkopplungskonstanten.

v	^{127}J $e q_v Q$	c_1	^{27}Al $e q_v Q$	$B_v + 2 Y_{02}(J+1)^2$
0	-309,567 (70)	0,0123 (15)	-25,499 (100)	3520,1711 (20)
1	-313,891 (100)	0,0153 (15)	-25,353 (150)	3503,4892 (20)
2	-318,178 (100)	0,0132 (15)	-25,460 (200)	3486,8668 (25)
3	-322,513 (130)	0,0125 (20)	-25,130 (300)	3470,3089 (30)

Tab. 2. Ergebnisse der Anpassung für $^{27}\text{Al}^{127}\text{J}$ (Werte in MHz).

Im Rahmen unserer Meßgenauigkeit ist es vernünftig, eine Mittelung der magnetischen Spin-Rotations-Kopplungskonstanten am Jodkern über die Schwingungszustände durchzuführen. Diese ergibt:

$$c_I(^{127}\text{J}) = +13,3(10) \text{ kHz}.$$

Der in der Arbeit von Wyse und Gordy⁵ angegebene Wert von $e q_0 Q(^{127}\text{J}) = -334(10) \text{ MHz}$ ist innerhalb ihres dreifachen Fehlers mit unserem Resultat verträglich.

¹ C. H. Townes u. B. P. Dailey, J. Chem. Phys. **17**, 782 [1949].

² J. Hoeft, F. J. Lovas, E. Tiemann u. T. Törring, J. Chem. Phys. **53**, 2736 [1970]. — E. Tiemann, Z. Naturforsch. **26 a**, 1809 [1971]. — E. Tiemann, J. Hoeft u. T. Törring, Z. Naturforsch. **27 a**, 869 [1972].

³ D. R. Lide jr., J. Chem. Phys. **42**, 1013 [1965]. — J. Hoeft, F. J. Lovas, E. Tiemann u. T. Törring, Z. Naturforsch. **25 a**, 1029 [1970]. — F. C. Wyse, W. Gordy u. E. F. Pearson, J. Chem. Phys. **52**, 3887 [1970].

⁴ D. R. Lide jr., J. Chem. Phys. **42**, 1013 [1965].

⁵ F. C. Wyse u. W. Gordy, J. Chem. Phys. **56**, 2130 [1972].

⁶ J. Hoeft, F. J. Lovas, E. Tiemann u. T. Törring, Z. Angew. Phys. **31**, 265 [1971].

⁷ B. Schenk, E. Tiemann u. J. Hoeft, Z. Naturforsch. **25 a**, 1827 [1970].

Hyperfeinstruktur von AlCl und AlBr

J. Hoeft, T. Törring und E. Tiemann

Institut für Molekülphysik der Freien Universität Berlin

(Z. Naturforsch. **28 a**, 1066–1068 [1973]; eingegangen am 5. April 1973)

Hyperfine Structure of AlCl and AlBr

The quadrupole hyperfine structure of $^{27}\text{Al}^{79}\text{Br}$ of the rotational transition $J=0 \rightarrow 1$ was measured. We obtained the following quadrupole coupling constants:

$$\begin{aligned} e q_0 Q(^{27}\text{Al}) &= -27.90 (50) \text{ MHz}, \\ e q_0 Q(^{79}\text{Br}) &= +78.78 (20) \text{ MHz}. \end{aligned}$$

The hyperfine structure of the rotational transition $J=1 \rightarrow 2$ of $^{27}\text{Al}^{35}\text{Cl}$, measured by Lide, was reassigned and the fit of the spectrum resulted in the molecule parameters:

$$\begin{aligned} e q_0 Q(^{27}\text{Al}) &= -29.8 (50) \text{ MHz}, \\ e q_0 Q(^{35}\text{Cl}) &= -8.6 (10) \text{ MHz}. \end{aligned}$$

Wir haben kürzlich über die Messung der Hyperfeinstruktur (HFS) des Rotationsspektrums von AlJ¹ berichtet. Die systematische Untersuchung zweiatomiger III/VII-Verbindungen wurde mit Messungen am AlBr fortgesetzt. Ihre Ergebnisse sollen einen Beitrag zur Analyse der Elektronenverteilung in dieser Molekülklasse liefern und Vergleiche mit anderen Molekülklassen ermöglichen.

Die Messungen wurden mit einem konventionellen 100 kHz-Stark-Effekt-Spektrometer durchgeführt. Die elektronische Anordnung wurde um einen „Signal Averager“ und eine Phasensynchronisation der Strahlungsquelle erweitert. Als heizbare Absorptionsquelle wurde der Typ III benutzt, wie er in ² beschrieben ist.

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. J. Hoeft, Institut für Molekülphysik der Freien Universität Berlin, D-1000 Berlin 33, Boltzmannstraße 20.

Messungen und Ergebnisse am AlBr

AlBr wurde unmittelbar in der Absorptionszelle bei Temperaturen um 620 °C aus den Elementen dargestellt. Dazu wurden die Zellenhälften mit einem Aluminiumbronze-Anstrich versehen, unter Vakuum getrocknet und bei 400 °C für einige Stunden ausgeheizt. Danach wurde die Zelle auf die Arbeitstemperatur erwärmt und gasförmiges Brom durch die Zelle gepumpt. Die Brommenge mußte sorgfältig mit einem Teflonventil dosiert werden, um ein optimales Verhältnis zwischen Linienbreite und Linienintensität zu erreichen. An den Enden des Heizbereiches schlug sich als Zersetzungsprodukt elementares Aluminium nieder, in den kalten Zonen der Zelle AlBr₃. Im Vergleich zu den in ¹ geschilderten Experimenten am AlJ gestalteten sich hier die Messungen schwieriger: Die Reaktionsrate scheint kleiner zu sein, wie man aus dem erreichten Signal-Rausch-Verhältnis schließen kann, und die Optimie-