

g_J-Faktor der Moleküle SiO und PbTe und Anisotropie der Magnetisierbarkeit von SiO

R. Honerjäger und R. Tischer

Institut für Molekülphysik der Freien Universität Berlin

(Z. Naturforsch. **29a**, 1695–1696 [1974]; eingegangen am 14. September 1974)

Molecular g_J-Factor of SiO and PbTe and Magnetic Susceptibility Anisotropy of SiO

The g_J -factor of the molecules $^{28}\text{Si}^{16}\text{O}$ and $^{208}\text{Pb}^{130}\text{Te}$ and the magnetic susceptibility anisotropy ξ_T of $^{28}\text{Si}^{16}\text{O}$ have been measured in the ground vibrational state:

$^{28}\text{Si}^{16}\text{O}$: $g_J = -0.1546(3)$, $\xi_T/h = 930(80) \text{ Hz}/(\text{kG})^2$,
 $^{208}\text{Pb}^{130}\text{Te}$: $g_J = -0.01800(18)$.

The molecular quadrupole moment and its electronic part are derived for the SiO molecule from g_J , ξ_T , and the rotational constant B_0 .

Wir haben die systematische Untersuchung der zweiatomigen IVa-VIa-Moleküle im $^1\Sigma$ Elektronengrundzustand fortgesetzt^{1,2} und magnetische Konstanten der Moleküle $^{28}\text{Si}^{16}\text{O}$ und $^{208}\text{Pb}^{130}\text{Te}$ gemessen. SiO ist die leichteste und PbTe die schwerste Moleköl der schweren flüchtigen IVa-VIa-Verbindungen. Mit SiO sind nunmehr sämtliche IVa-Oxide magnetisch vermessen worden (CO-Moleköl vgl.³).

Die Messungen wurden mit dem in⁴ beschriebenen Hochtemperatur-Mikrowellenspektrometer durchgeführt. Substanzbehälter und Absorptionszelle bestanden aus 0,1 mm dickem Tantalblech. Als Ausgangssubstanzen dienten reines SiO und PbTe. In Tab. 1 sind einige das Experiment betreffende Daten zusammengestellt. – Für eine Zellentemperatur von 1100 °C (SiO) werden etwa 900 W Heizleistung benötigt; ihr entspricht im vorliegenden Falle eine effektive Heizstromstärke (50 Hz Wechselstrom) von 160 A. Stromfäden und Magnetfeld verlaufen in unserer Anordnung weitgehend parallel zueinander. Doch treten Querfelder (bedingt durch Inhomogenität des Feldes) und Querströme (infolge unvermeidbarer Verformungen des Tantalblechs) auf, so daß Lorentz-Kräfte auf die stromdurchflossene Zelle im Magnetfeld wirken. Bei einer effektiven Heizstromstärke von 160 A und Magnetfeldern oberhalb von 25 kG beginnt die Zelle unter dem Einfluß die-

ser Lorentz-Kräfte so stark zu schwingen, daß Messungen mit höherer Magnetfeldstärke als 25 kG nicht durchgeführt werden konnten. Die relativ hohe Zellentemperatur hat darüber hinaus noch folgende Konsequenzen. Das übliche Modulationsverfahren mittels Stark-Effekt ist nicht anwendbar. Infolge der hohen Temperatur setzt (insbesondere in Gegenwart des Magnetfeldes) eine Gasentladung bereits bei extrem niedrigem Stark-Feld ein und verhindert die Messung. Außerdem zeigte sich, daß die Transmission der Zelle mit koaxialer Stark-Elektrode (vgl.⁴) bei 43 GHz während des Aufheizens auf 1100 °C laufend sinkt bis auf Werte unter 1%; ohne Stark-Elektrode beträgt sie bei 1100 °C ca. 30% und bleibt zeitlich konstant. Beide Schwierigkeiten ließen sich durch Einsatz der von Törring⁵ im hiesigen Institut entwickelten Technik der Sättigungsmodulation überwinden, die im Vergleich zur Stark-Modulation das erreichbare Signal-Rausch-Verhältnis nicht wesentlich reduziert. – Diese Technik erwies sich auch bei der schweren Moleköl PbTe als überaus nützlich. Aus Intensitätsgründen wählten wir einen Übergang mit relativ hoher Rotationsquantenzahl J . Die dann für eine Modulation erforderlichen Stark-Felder überschreiten die Durchbruchsfeldstärke in der heißen Zelle (mit Magnetfeld), so daß auch in diesem Falle eine Modulation mittels Stark-Effekt nicht möglich ist.

Tab. 2. Molekölkonstanten für den Schwingungsgrundzustand (ν_0 ist die Frequenz der feldfreien Linie; g_J ist relativ zum Kernmagneton definiert).

	$^{28}\text{Si}^{16}\text{O}$	$^{208}\text{Pb}^{130}\text{Te}$
ν_0 [MHz]	($J=0 \rightarrow 1$) 43423,847(10) ^a 43423,85 ^b 43423,76(10) ^c	($J=22 \rightarrow 23$) 43124,285(10) ^a 43124,296(42) ^d
g_J	-0,1546(3)	-0,01800(18)
ξ_T/h [Hz/(kG) ²]	930(80)	[4(1) · 10 ³] ^e
Θ/e [\AA^2]	-0,95(23)	—
$\Theta^{el}/(-e)$ [\AA^2]	12,59(23)	—

^a Diese Arbeit.

^b Klemperer und Mitarbeiter⁷.

^c Törring⁶.

^d Berechnet nach Tiemann und Mitarbeiter⁸.

^e Kein unmittelbarer Meßwert, vgl. Text.

Tab. 1. Natürliche Häufigkeit (%), Zellentemperatur (°C), Rotationslinie $J \rightarrow J+1$, Linienbreite ($2 \Delta\nu$ = volle Halbwertsbreite), Magnetfeld H und entsprechende Zeeman-Aufspaltung $\nu_+ - \nu_-$ im Felde H .

Moleköl	%	°C	$J \rightarrow J+1$	$\Delta\nu$ [kHz]	H [kG]	$\nu_+ - \nu_-$ [MHz]
$^{28}\text{Si}^{16}\text{O}$	92	1100 ... 1200	$0 \rightarrow 1$	110 ... 120	2,5 ... 25	0,6 ... 5,8
$^{208}\text{Pb}^{130}\text{Te}$	18	670	$22 \rightarrow 23$	110 ... 120	24,5 ... 34,5	0,66 ... 0,95

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. R. Honerjäger, D-1000 Berlin 45, Karwendelstraße 27c.

Tabelle 2 enthält die Meßergebnisse. Sie sind nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate mit Gewichten aus Einzelmessungen bestimmt (vgl. ⁴). Die in Einheiten der letzten Dezimalen angegebenen Fehler sind die Standardabweichungen. Nur für den Wert von ξ_T/h der SiO-Moleköl haben wir denjenigen Fehler angegeben, den man aus der Ableseunsicherheit ($1/10 \Delta\nu$) der Frequenz der Einzelleinie und der Anzahl der unabhängigen Messungen dieser Linie erhält. Reine Rotationslinien der ²⁸Si¹⁶O- und ²⁰⁸Pb¹³⁰Te-Moleköl sind von Törring ⁶ und Klemperer u. a. ⁷ bzw. von Tiemann u. a. ⁸ gemessen worden. Unsere Werte sind zum Vergleich aufgeführt. — Für die SiO-Moleköl lassen sich der g_J -Faktor und die Anisotropie ξ_T der Magnetisierbarkeit in bekannter Weise (vgl. z. B. ⁴) aus Linienaufspaltung und -verschiebung im Magnetfeld bestimmen. Mit g_J , ξ_T und der Rotationskonstanten B_0 berechnet man (vgl. z. B. ²) das auf den Massenschwerpunkt bezogene Quadrupolmoment Θ der elektrischen Ladungsverteilung und seinen elektronischen Anteil Θ^0 . — Die $2 \times 45 \sigma$ -Zeeman-Komponenten des Rotationsübergangs $J = 22 \rightarrow 23$ der PbTe-Moleköl werden vom Spektrometer nicht auf-

gelöst. Man registriert statt dessen zwei inhomogen verbreiterte „Linien“, aus deren Frequenzabstand der g_J -Faktor folgt [vgl. ⁴, Gl. (14)]. Infolge Anisotropie der Magnetisierbarkeit ist der Schwerpunkt des σ -Linienpaares bei einem Magnetfeld von 34,5 kG um -45 kHz gegen die feldfreie Rotationslinie verschoben. Leider ist es nicht möglich, diese Verschiebung quantitativ auszuwerten, da das verwendete Sättigungsmodulationsverfahren eine Rekonstruktion der inhomogen verbreiterten „Linie“ aus Einzelleinien (wie in ⁴) nicht zuläßt. Die Interrelation zwischen ξ_T , g_J , B und Θ erlaubt jedoch eine Abschätzung für ξ_T/h . Unter der Annahme, daß Θ/e im (sicher zu groß gewählten) Intervall von $-1,5$ bis $+4,5 \text{ \AA}^2$ liegt, erhält man $\xi_T/h = 4(1) \text{ kHz/(kG)}^2$. Die oben angegebene Linienschwerpunktsverschiebung ist mit diesem Wert gut verträglich.

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die großzügige finanzielle Unterstützung dieser Arbeit. Herrn Prof. Dr. T. Törring danken wir für die Bereitstellung von Modulator und Empfänger für die Sättigungsmodulation.

¹ R. Honerjäger u. R. Tischer, Z. Naturforsch. **28a**, 1372 [1973].

² R. Honerjäger u. R. Tischer, Z. Naturforsch. **28a**, 1374 [1973].

³ K. H. Hellwege (Hrsg.), Landolt-Börnstein-Tabellen (Neue Serie), Bd. II/6. Berlin, Springer-Verlag 1974.

⁴ R. Honerjäger u. R. Tischer, Z. Naturforsch. **28a**, 458 [1973].

⁵ T. Törring, J. Mol. Spectr. **48**, 148 [1973].

⁶ T. Törring, Z. Naturforsch. **23a**, 777 [1968].

⁷ J. W. Raymonda, J. S. Muenter u. W. A. Klemperer, J. Chem. Phys. **52**, 3458 [1970].

⁸ E. Tiemann, J. Hoeft u. B. Schenk, Z. Naturforsch. **24a**, 787 [1969].