

# Zeeman-Effekt im Mikrowellenrotationsspektrum der AlF-Molekel

R. Honerjäger und R. Tischer

Institut für Molekülphysik der Freien Universität Berlin

(Z. Naturforsch. **29 a**, 342–345 [1974]; eingegangen am 21. Dezember 1973)

## *Zeeman Effect in the Microwave Rotational Spectrum of the AlF Molecule*

The Zeeman effect in the microwave rotational spectrum of  $^{27}\text{Al}^{19}\text{F}$  has been measured in the ground vibrational state  $v=0$  in order to determine the  $gJ$ -factor and the molecular magnetic susceptibility anisotropy  $\xi_T$ :

$$gJ = -0.08051(8); \quad \xi_T/h = 434(38) \text{ Hz/(kG)}^2.$$

The molecular quadrupole moment and its electronic part are derived from the values of  $gJ$ ,  $\xi_T$ , and the rotational constant  $B_0$ . — The spectrum obtained in the magnetic field exhibits resolvable hyperfine structure from the  $^{27}\text{Al}$  nucleus with spin  $I = 5/2$  and enabled us to determine the magnetic shielding anisotropy of this nucleus:

$$\sigma_T = -224(71) \cdot 10^{-6}.$$

This value agrees reasonably well with an estimated one obtained from an interrelation with the spin-rotation interaction constant  $c_I$ .

In vorangehenden Arbeiten<sup>1–3</sup> haben wir magnetische Konstanten von zweiatomigen IV a–VI a-Molekeln (GeO, SnO, PbO, SiS) und einer III a–VII a-Molekel (TiF) gemessen. Die Molekeln beider Klassen besitzen die gleiche Anzahl (10) von Valenzelektronen, unterscheiden sich aber durch die Differenz der beiden Valenzelektronenzahlen, welche die zwei Atome zur chemischen Bindung beitragen. Der üblichen Vorstellung entsprechend, erwartet man eine stärker „ionische“ Bindung bei den III a–VII a- und eine mehr „homöopolare“ bei den IV a–VI a-Molekeln. Man darf vermuten, daß dieser Unterschied in Bindungstyp sich auch in den Werten für die magnetischen Molekelkonstanten in charakteristischer Weise widerspiegelt. Um zur Klärung dieser Frage beizutragen, haben wir eine weitere Molekel aus der Klasse der III a–VII a-Verbindungen untersucht: das Aluminiummonofluorid.

Im Gegensatz zu fast allen natürlichen Isotopen der Elemente der Gruppen IV a und VI a haben sämtliche (natürliche) III a- und VII a-Elemente von Null verschiedene Kernspinwerte. Daher sind die Rotationsspektren der III a–VII a-Molekeln infolge von Hyperfeinstruktur wesentlich linienreicher als die der IV a–VI a-Verbindungen. Entsprechend größer wird auch der notwendige mathematische Aufwand für die Berechnung der Molekelkonstanten aus dem Spektrum. Andererseits erhält man zusätzliche Information über die Molekel in Gestalt der Hyperfeinstrukturkonstanten. Das von uns verwendete

Spektrometer löst die geringe vom  $^{19}\text{F}$ -Kern ( $I = \frac{1}{2}$ ) herrührende (allein magnetische) Hyperfeinstrukturaufspaltung nicht auf. Deshalb sind insbesondere alle III a-Fluoride vom Typ einer zweiatomigen Molekel, bei der (aufgelöste) Hyperfeinstruktur nur von einem der beiden Kerne, nämlich dem der III a-Elemente, verursacht wird.

Das reine Mikrowellenrotationsspektrum der AlF-Molekel ist von Lide<sup>4</sup>, Hoeft u. a.<sup>5</sup> und Wyse u. a.<sup>6</sup> gemessen und analysiert worden. Wir haben die Zeeman-Effekt-Messungen mit dem in<sup>1</sup> beschriebenen Mikrowellenspektrometer durchgeführt. Auf Grund von früher<sup>7</sup> im hiesigen Institut gewonnenen Erfahrungen wurde das Aluminiummonofluorid (natürliches Isotop: 100%  $^{27}\text{Al}^{19}\text{F}$ ) aus einem Gemisch von Al- und  $\text{AlF}_3$ -Pulver abgedampft. Substanzbehälter und Absorptionszelle bestanden aus 0,1 mm dickem Tantalblech. Bei einer Temperatur von ca. 625 °C betrug die Linienbreite  $\Delta\nu = 100 \text{ kHz}$  ( $2 \Delta\nu =$  volle Halbwertsbreite). Die Messungen erstreckten sich über den Magnetfeldbereich von 5 bis 44 kG. Der Strom durch das supraleitende Solenoid wurde auf  $10^{-4}$  genau gemessen, so daß der gesamte Meßfehler für das Magnetfeld nunmehr allein von der Ungenauigkeit der Mittelwertbildung des Feldes über den Absorptionsbereich herrührt. Alles in allem ist  $10^{-3}$  eine obere Schranke für den relativen Fehler des Magnetfeldes. — Sämtliche Messungen wurden am Rotationsübergang  $J=0 \rightarrow 1$  (und im Schwingungsgrundzustand  $v=0$ ) durchgeführt, da hier das Spektrum am wenigsten dicht, die Einzellinie relativ am intensivsten und ihre Modulierbarkeit durch Stark-Effekt am größten ist.

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



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.

Die Theorie des Zeeman-Effektes von zweiatomigen Molekeln mit Hyperfeinstruktur in  $^1\Sigma$ -Elektronenzuständen ist von Schlier<sup>8</sup> und Hüttner und Flygare<sup>9</sup> zusammenfassend dargestellt. Wir benutzen hier diejenige Darstellung des Hamilton-Operators  $\mathbf{H}$  von Schlier<sup>8</sup>, welche nur die Matrixelemente liefert, die diagonal in der Drehimpulsquantenzahl  $J$  sind. Die außerdem allein noch möglichen Matrixelemente mit  $\Delta J = \pm 2$  geben Anlaß zu Term- und Linienverschiebungen, die wesentlich kleiner als der Meßfehler

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\mathfrak{S}} = & -g_J \mu_n (\mathfrak{S} \cdot \mathbf{J}) - \xi_T \frac{3(\mathfrak{S} \cdot \mathbf{J})^2 - \mathfrak{S}^2 \mathbf{J}^2}{(2J-1)(2J+3)} - g_I(1 - \sigma_S) \mu_n (\mathfrak{S} \cdot \mathbf{I}) \\ & + g_I \sigma_T \mu_n \frac{3(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})(\mathfrak{S} \cdot \mathbf{J}) + 3(\mathfrak{S} \cdot \mathbf{J})(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}) - 2\mathbf{J}^2(\mathfrak{S} \cdot \mathbf{I})}{(2J-1)(2J+3)}. \end{aligned} \quad (3)$$

Es bedeuten  $\mathbf{H}_{\text{rot, vib}}$  den Hamilton-Operator des schwingenden Rotators,  $\mathbf{J}$  den Operator des Rotator-drehimpulses und  $\mathbf{I}$  den des Kernspins,  $J$  bzw.  $I$  die zugehörigen Quantenzahlen,  $eqQ$  die Kernquadrupolkopplungskonstante,  $c_I$  die Kernspin-Rotations-Wechselwirkungskonstante,  $\mathfrak{S}$  das angelegte Magnetfeld,  $g_J$  und  $g_I$  den molekularen bzw. Kern- $g$ -Faktor (beide relativ zum Kernmagneton  $\mu_n$ ),  $\xi_T = \frac{1}{3}(\xi_{\perp} - \xi_{\parallel})$  die Anisotropie der Magnetisierbarkeit der Molekel ( $\xi_{\perp}$  und  $\xi_{\parallel}$  sind die Magnetisierbar-

sind. Mit  $\mathbf{H}_0$  werde der Hamilton-Operator der Molekel bei Abwesenheit eines äußeren Feldes bezeichnet und mit  $\mathbf{H}_{\mathfrak{S}}$  der zusätzliche Hamilton-Operator beim Anlegen eines äußeren Magnetfeldes. Dann gilt

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_{\mathfrak{S}}, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_{\text{rot, vib}} - e q Q \frac{3(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})^2 + \frac{3}{2}(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}) - \mathbf{I}^2 \mathbf{J}^2}{2I(2I-1)(2J-1)(2J+3)} \\ + c_I(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}), \end{aligned} \quad (2)$$

keiten senkrecht bzw. parallel zur Kernverbindungsline),  $\sigma_S = \frac{1}{3}(2\sigma_{\perp} + \sigma_{\parallel})$  den skalaren Anteil der magnetischen Abschirmung des Kernes („chemische Verschiebung“) und  $\sigma_T = \frac{1}{3}(\sigma_{\perp} - \sigma_{\parallel})$  die Anisotropie der magnetischen Abschirmung des Kernes ( $\sigma_{\perp}$  und  $\sigma_{\parallel}$  sind die magnetischen Abschirmkonstanten senkrecht bzw. parallel zur Kernverbindung). Alle den Kern betreffenden Größen beziehen sich auf den  $^{27}\text{Al}$ -Kern ( $I = \frac{5}{2}$ ). – Die Eigenwerte des Operators  $\mathbf{H}_0$  sind (vgl. z. B. <sup>10</sup>):

$$\begin{aligned} E_0 = \sum_{i,k}^{0,\dots,\infty} Y_{ik} (v + \frac{1}{2})^i J^k (J+1)^k - e q Q \frac{\frac{3}{2}C(C+1) - I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)(2J-1)(2J+3)} + \frac{c_I}{2} C, \\ C = F(F+1) - J(J+1) - I(I+1). \end{aligned} \quad (4)$$

$Y_{ik}$  sind die Dunham-Energieparameter des schwingenden Rotators,  $v$  ist die Schwingungsquantenzahl und  $F$  die Quantenzahl zum Gesamtdrehimpulsoperator  $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$ . Die Eigenwerte des Operators  $\mathbf{H}$  sind (mit Ausnahme einiger Spezialfälle) nicht geschlossen angebar. Wir lösen das Eigenwertproblem durch Diagonalisieren der Matrix von  $\mathbf{H}$  in dem Vektorraum, der durch die Eigenfunktionen von  $\mathbf{H}_0$  aufgespannt wird. Diese Funktionen der gekoppelten Darstellung sind  $|vJIm_F\rangle$ .  $m_F$  ist die magnetische Quantenzahl von  $\mathbf{F}$  in Richtung von  $\mathfrak{S}$ . Die Matrixelemente können mit den Formeln von Condon und Shortley<sup>11</sup> berechnet oder der Arbeit von Hüttner und Flygare<sup>9</sup> entnommen werden. Im Falle von Rotationsübergängen  $J=0 \rightarrow 1$  ist die zu diagonalisierende Matrix maximal von der Ordnung drei. Wir haben diese Diagonalisierungen mittels der Rechanlage CD Cyber 72 des Rechenzentrums der Universität mit einem Fortran-Programm durchgeführt.

Die Auswahlregeln  $\Delta J = \pm 1$  und  $\Delta m_F = \pm 1$  ( $\sigma$ -Zeeman-Effekt) liefern insgesamt 12  $I$ , also 30 Linien für Übergänge  $J=0 \rightarrow 1$  im äußeren Magnetfeld. Mit wachsender Feldstärke sterben eine Reihe dieser Linien aus bis auf  $2(2I+1)$  (hier also 12) im Grenzfall des starken Feldes. Die Linienfrequenzen hängen entsprechend dem angegebenen Hamilton-Operator ab von den 7 Molekelkonstanten  $eqQ$ ,  $c_I$ ,  $g_J$ ,  $\xi_T$ ,  $g_I(1 - \sigma_S)$ ,  $g_I \sigma_T$  und der Frequenz  $\nu_0$  des reinen Rotationsüberganges im Schwingungsgrundzustand  $v=0$ . Insbesondere bestimmen die Konstanten  $g_J$ ,  $\xi_T$ ,  $g_I(1 - \sigma_S)$  und  $g_I \sigma_T$  die Variation der Linienfrequenzen mit dem Magnetfeld.

Wir haben mit unserem Rechenprogramm auch die Linienintensität ausrechnen lassen. Das Aufsuchen und Identifizieren eines bestimmten Überganges, der von 7 freien Parametern abhängt, wird erheblich erleichtert, wenn man die zu erwartende Linienintensität kennt. Des weiteren hängen die Fre-

quenzen der verschiedenen möglichen Übergänge nicht alle „gleich stark“ von einer Molekelkonstanten ab. Zum Beispiel variieren gerade diejenigen Linien, welche im starken Magnetfeld aussterben, besonders empfindlich mit  $g_I(1 - \sigma_S)$ , während man aus diesen Linien  $g_I$  nur schlecht und  $\xi_T$  gar nicht bestimmen kann. Meßbar sind also bestimmte Molekelkonstanten überhaupt nur dann, wenn die Intensität ganz bestimmter Linien ausreichend ist. Schließlich kommt es häufig vor, daß benachbarte Linien einander überlappen, so daß nur eine „Summenlinie“ registriert wird. Nur bei Kenntnis der relativen Intensitäten (und der Linienform) der Einzellinien ist es möglich, das Maximum oder die Maxima der Summenlinie aus den Einzellinien zu rekonstruieren, von deren Lage die betreffenden Molekelkonstanten abhängen. Soweit im Spektrum überlappende Linien gemessen wurden, haben wir – ausgehend von Einzellinien mit Lorentz-Profil – Summenlinien gebildet, deren Maxima bestimmt und diese durch Variation der Molekelkonstanten an die experimentell gemessenen angepaßt.

Das nichtlineare Gleichungssystem zwischen (zu bestimmenden) Molekelkonstanten und (gemessenen) Linienfrequenzen wurde vom Rechner iterativ gelöst. In einer ersten Anpaßrechnung haben wir sämtliche genannten 7 Molekelkonstanten, von denen die Linienfrequenzen abhängen, variiert. Wir wollen zwei Molekelkonstanten gesondert diskutieren:  $g_I(1 - \sigma_S)$  und  $g_I \sigma_T$ . – Die erste Anpaßrechnung liefert die Konstante  $g_I(1 - \sigma_S)$  auf  $10^{-3}$  genau. Der Meßwert stimmt innerhalb der dreifachen Standardabweichung mit dem von Fuller und Cohen<sup>12</sup> verzeichneten Literaturwert überein, dessen Fehler mit  $10^{-4}$  angegeben ist. – Aus den von uns ermittelten Werten für  $g_I \sigma_T$  und  $g_I(1 - \sigma_S)$  folgt (mit Rücksicht auf  $\sigma_S \ll 1$ )  $\sigma_T = -224(71) \cdot 10^{-6}$ . Der Wert für die Anisotropie der magnetischen Abschirmung ist also gerade so groß wie die dreifache Standardabweichung. Daß  $\sigma_T$  auf die beschriebene Weise nur mit großem Fehler bestimmt werden kann, leuchtet ein, wenn man die von  $\sigma_T$  hervorgerufene Linienverschiebung  $\Delta\nu \approx g_I \sigma_T (\mu_N/h) \xi$  ( $= 11$  kHz für 44 kG) vergleicht mit der Meßunsicherheit der Einzellinie ( $1/10$  Linienbreite  $= 10$  kHz). Es erscheint daher sinnvoller, für die endgültige Auswertung einen genaueren halbempirischen Wert für  $\sigma_T$  zu benutzen, der auf folgende Weise gewonnen wurde. Es sei  $\langle \Theta/r^3 \rangle$  das mit  $1/r^3$  gewichtete molekulare elektrische Quadrupolmoment bezogen auf denjenigen

Kern der Molekel, welcher die Spin-Rotations-Wechselwirkungskonstante  $c_I$  produziert und dessen magnetisches Moment um  $\sigma_{S,T}$  abgeschirmt wird. Die Interrelation<sup>13</sup>

$$\left\langle \frac{\Theta}{r^3} \right\rangle = - \frac{m_e c^2}{e} \left( 6 \sigma_T + \frac{M_p}{m_e} \frac{c_I}{g_I B} \right) \quad (5)$$

verknüpft  $\langle \Theta/r^3 \rangle$  mit  $\sigma_T$ ,  $c_I$ ,  $g_I$  und der Rotationskonstanten  $B$  der Molekel. Es bedeuten  $e$  ( $> 0$ ) die Elementarladung,  $c$  die Lichtgeschwindigkeit und  $M_p$  ( $m_e$ ) die Protonen- (Elektronen-) Masse. Ein Vergleich mit bislang bekannten Daten der III a – VII a-Verbindungen BF<sup>14</sup>, TIF<sup>15</sup> und TiCl<sup>13</sup> zeigt, daß sich die beiden Beiträge zu  $\langle \Theta/r^3 \rangle$  auf der rechten Seite von Gl. (5) bis auf wenige Prozent ihres Wertes nahezu aufheben. Wenn man annimmt, daß dieser Sachverhalt auch für die III a – VII a-Molekel AlF gilt, dann sollte die Beziehung

$$\sigma_T^* = - \frac{1}{6} \frac{M_p c_I}{m_e g_I B} \quad (6)$$

einen bis auf einige Prozent genauen Wert für  $\sigma_T$  liefern. Man kann diese „erste Näherung“ sogar noch ein wenig verbessern. Bildet man nämlich mit den  $\sigma_T$ -Werten für BF, TIF und TiCl die Quotienten  $\sigma_T/\sigma_T^*$ , so findet man, daß  $\sigma_T/\sigma_T^*$  fast konstant ist (BF: 1,0575; TIF: 1,084; TiCl: 1,078). Mit  $\sigma_T = 1,07 \sigma_T^*$  erhalten wir  $\sigma_T = -111(22) \cdot 10^{-6}$  für die AlF-Molekel. Dieser Wert ist etwa um den Faktor 1/2 kleiner als unser aus der ersten Anpaßrechnung gewonnener direkter Meßwert, aber in Anbetracht des großen Fehlers des Meßwertes durchaus mit ihm verträglich.

Mit diesem halbempirischen Wert für  $\sigma_T$  und dem Literaturwert<sup>12</sup> für  $g_I(1 - \sigma_S)$  haben wir eine zweite Anpaßrechnung durchgeführt, bei der nur noch die verbleibenden 5 Parameter  $eqQ$ ,  $c_I$ ,  $g_I$ ,  $\xi_T$  und  $\nu_0$  variiert wurden. Um die Berechtigung eines solchen Vorgehens zu prüfen, haben wir die gemessenen Linienfrequenzen mit den zurückgerechneten verglichen. Es zeigte sich, daß die Ergebnisse beider Anpaßrechnungen miteinander verträglich bleiben, wenn  $1/10$  Linienbreite als Frequenzfehler der jeweiligen Linie angenommen wird. In Tab. 1 sind die nach der zweiten Anpaßrechnung bestimmten Molekelkonstanten zusammen mit Literaturwerten aufgeführt. Die in Einheiten der letzten Dezimalen angegebenen Fehler sind die Standardabweichungen. Nur für  $\nu_0$  und  $\xi_T/h$  geben wir die doppelte Standardabweichung an, da die Korrelation dieser bei-

Tab. 1. Konstanten der Molekel  $^{27}\text{Al}^{19}\text{F}$  für den Schwingungsgrundzustand  $v=0$ .

$\nu_0 (J=0 \rightarrow 1) [\text{MHz}]$	32976,581 (10) <sup>a</sup> 32976,60 (22) <sup>b</sup> 32976,604 (35) <sup>c</sup> 32976,572 (15) <sup>d</sup>
$e q Q (^{27}\text{Al}) [\text{MHz}]$	-37,487 (43) <sup>a</sup> -37,6 (10) <sup>b</sup> -37,53 (12) <sup>c</sup> -37,59 (25) <sup>d</sup>
$c_I (^{27}\text{Al}) [\text{kHz}]$	8,2 (13) <sup>a</sup> 8 (6) <sup>c</sup>
$g_I$	-0,08051 (8)
$\xi_T/h [\text{Hz}/(\text{kG})^2]$	434 (37)
$\Theta/e [\text{\AA}^2]$	-1,23 (10)
$\Theta^{\text{el}}/(-e) [\text{\AA}^2]$	15,85 (10)
$g_I(1-\sigma_S)$	1,4554 <sup>e</sup>
$\sigma_T$	-224 (71) $\cdot 10^{-6}$ f -111 (22) $\cdot 10^{-6}$ g

<sup>a</sup> Diese Arbeit.<sup>b</sup> Lide<sup>4</sup>.<sup>c</sup> Hoeft u. a.<sup>5</sup>.<sup>d</sup> Wyse u. a.<sup>6</sup>.<sup>e</sup> Fuller und Cohen<sup>12</sup>.<sup>f</sup> Meßwert aus der ersten Anpaßrechnung.<sup>g</sup> Aus der Interrelation Gleichung (5).

den Molekelkonstanten groß ist und  $\nu_0$  durch die Wahl von  $g_I(1-\sigma_S)$  weitgehend festgelegt wird. Innerhalb der so angegebenen Fehler überdecken sich auch die Lösungen aus den beiden Anpaßrechnungen. Die Tabelle enthält ebenfalls das aus  $g_I$  und  $\xi_T$  berechenbare (vgl. z. B.<sup>1</sup>), auf den Massenschwerpunkt bezogene Quadrupolmoment  $\Theta$  der elektrischen Ladungsverteilung und seinen elektronischen Anteil  $\Theta^{\text{el}}$ . — In Abb. 1 sind die mit den Molekelkonstanten der Tab. 1 berechneten Linienfrequenzen relativ zur reinen Rotationslinie  $\nu_0$  (des Rotators ohne Hyperfeinstruktur) in Abhängigkeit vom Magnetfeld aufgetragen. Zum Vergleich sind die Meßpunkte durch Kreuze markiert. Die theoretischen Kurven sind nur in demjenigen Feldbereich ausgezogen gezeichnet, in welchem die Linienintensität größer als 0,5% der Intensität des (hypothetischen) reinen Rotationsüberganges ist. Dies ent-

spricht auch ungefähr der Grenzempfindlichkeit unseres Spektrometers. — Wir werden die Meßresultate diskutieren, sobald die Ergebnisse für eine weitere III a – VII a-Molekel vorliegen. Entsprechende Untersuchungen an der GaF-Molekel sind in Arbeit.

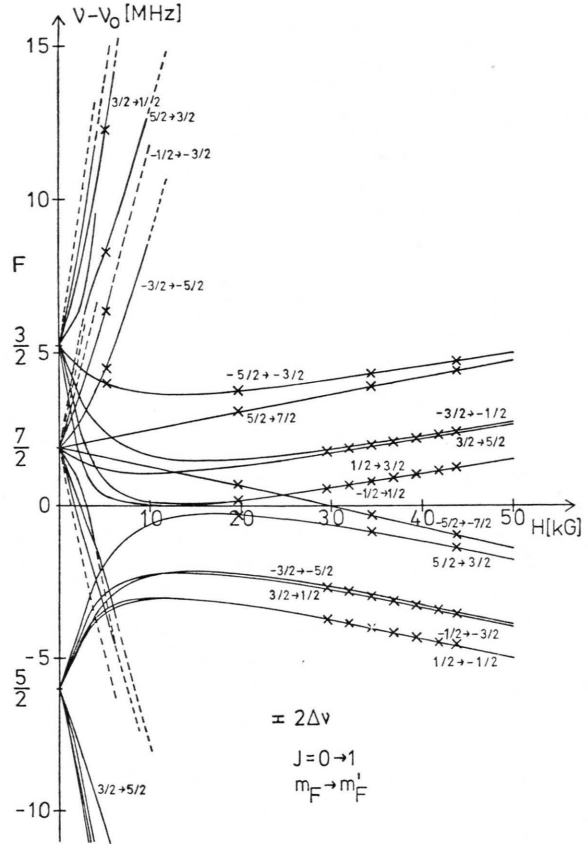


Abb. 1. Verlauf der Linienfrequenzen  $\nu(J=0 \rightarrow 1; \Delta m_F = \pm 1)$  relativ zur Rotationslinie  $\nu_0$  des Rotators ohne Hyperfeinstruktur in Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld. Meßpunkte sind durch Kreuze markiert.  $2\Delta\nu$  ist die volle Halbwertsbreite der Linien.

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die großzügige finanzielle Unterstützung dieser Arbeit.

- <sup>1</sup> R. Honerjäger u. R. Tischer, Z. Naturforsch. **28 a**, 458 [1973].
- <sup>2</sup> R. Honerjäger u. R. Tischer, Z. Naturforsch. **28 a**, 1372 [1973].
- <sup>3</sup> R. Honerjäger u. R. Tischer, Z. Naturforsch. **28 a**, 1974 [1973].
- <sup>4</sup> D. R. Lide, Jr., J. Chem. Phys. **38**, 2027 [1963]; **42**, 1013 [1965].
- <sup>5</sup> J. Hoeft, F. J. Lovas, E. Tiemann u. T. Törring, Z. Naturforsch. **25 a**, 1029 [1970].
- <sup>6</sup> F. C. Wyse, W. Gordy u. E. F. Pearson, J. Chem. Phys. **52**, 3887 [1970].
- <sup>7</sup> J. Hoeft, F. J. Lovas u. T. Törring, Z. Naturforsch. **25 b**, 901 [1970].

<sup>8</sup> C. Schlier, Fortschritte Phys. **9**, 455 [1961].

<sup>9</sup> W. Hüttner u. W. H. Flygare, J. Chem. Phys. **47**, 4137 [1967].

<sup>10</sup> C. H. Townes u. A. L. Schawlow, Microwave Spectroscopy, McGraw-Hill Book Co., New York 1955.

<sup>11</sup> E. U. Condon u. G. H. Shortley, The Theory of Atomic Spectra, Cambridge, University Press, 1967, S. 59–67.

<sup>12</sup> G. H. Fuller u. V. W. Cohen, Nucl. Data Tables **5 A**, 433 [1969].

<sup>13</sup> R. Ley u. W. Schauer, Z. Naturforsch. **27 a**, 77 [1972].

<sup>14</sup> R. A. Hegstrom u. W. N. Lipscomb, J. Chem. Phys. **48**, 809 [1968].

<sup>15</sup> R. v. Boeckh, G. Gräff u. R. Ley, Z. Phys. **179**, 285 [1964].