

Photodetachment bei einigen zweiatomigen negativen Hydridionen: BeH⁻, MgH⁻, CaH⁻, ZnH⁻, PH⁻, AsH⁻

R. Rackwitz und D. Feldmann

I. Institut für Experimentalphysik, Universität Hamburg

H. J. Kaiser und E. Heinicke

II. Physikalisches Institut, Universität Heidelberg

(Z. Naturforsch. **32a**, 594–599 [1977]; eingegangen am 19. April 1977)

Photodetachment of Some Diatomic Negative Hydride Ions BeH⁻, MgH⁻, CaH⁻, ZnH⁻, PH⁻, AsH⁻

The cross sections have been measured in a photon energy range between 0.5 eV and 3 eV. From threshold energies the electron affinities of the molecules have been determined.

Einleitung

Photodetachmentmessungen sind an zahlreichen negativen Molekülien durchgeführt worden^{1–3}, einerseits als Laser-Photoelektronen-Spektroskopie (LPES)-Messungen und zum anderen unter Verwendung von Lichtquellen variabler Photonenergie.

Bei Untersuchungen nach der ersten Methode (LPES) wurden genaue Werte für Elektronenaffinitäten und Molekülkonstanten (Vibrationsenergien, Kerngleichgewichtsabstände) und auch in einigen Fällen die energetische Lage von elektronisch angeregten Ionen- und Molekülzuständen bestimmt.

Bei Photodetachmentmessungen mit variabler Photonenergie kann man die Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnittes bestimmen und aus Einsatzschwellen im Querschnitt Aussagen über die Ionen und die neutralen Moleküle ableiten.

Wir haben die Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnittes für Photodetachment bei einigen einfachen Molekülen bestimmt. Nach einigen Vorbermerkungen zum Photodetachmentprozeß bei Molekülien und Erläuterungen zur experimentellen Durchführung sollen die Ergebnisse diskutiert werden.

Photodetachment bei Molekülien

Gegenüber Photodetachment bei atomaren negativen Ionen sind bei der Untersuchung des Prozesses $AB^- + h\nu \rightarrow AB + e^-$ (AB^- negatives Molekülion, $h\nu$ Photon, e^- Elektron) bei Molekülen folgende zusätzliche Komplikationen zu beachten:

Sonderdruckanforderungen an R. Rackwitz, I. Institut für Experimentalphysik der Universität Hamburg, Jungiusstraße 9, D-2000 Hamburg 36.

1. Es besteht die Möglichkeit, daß neben Photodetachment auch Photodissoziation ($AB^- + h\nu \rightarrow A + B^-$) auftritt.

2. Es können Vibrations- und Rotationsanregungen des Ions und des neutralen Moleküls auftreten.

3. Bei Photoprozessen an Molekülen ist das Franck-Condon-Prinzip zu beachten; wenn also die Potentialminima der Ionen- und Molekülkurve nicht bei etwa gleichem Kernabstand liegen, entsteht beim Photodetachment ein vibrationsangeregtes Molekül, und daher kann aus der niederenergetischen Einsatzschwelle nicht in jedem Fall ein Wert für die Elektronenaffinität des Moleküls bestimmt werden.

4. Die Wirkungsquerschnitte für Übergänge zwischen den im Ionenstrahl vorliegenden Rotations-Vibrations-Zuständen des Ions zu den verschiedenen Rotations-Vibrations-Zuständen des Moleküls überlagern sich zu dem gemessenen Gesamtwirkungsquerschnitt. Das Schwellenverhalten für die einzelnen Übergänge läßt sich nicht exakt vorhersagen⁴, und da die Messungen mit relativ geringer Photonenergieauflösung durchgeführt wurden, ist eine Trennung dieser überlagerten Einsatzschwellen nur in besonders günstigen Fällen möglich.

Experimentelles

Die Meßmethode soll hier nur kurz skizziert werden, da die verwendete Apparatur an anderer Stelle⁵ ausführlicher beschrieben ist.

Ein massenselektierter Strahl negativer Ionen wird senkrecht von dem Licht aus einer Xenon-Hochdrucklampe getroffen, das zuvor in einem Monochromator nach Wellenlängen sortiert wird. Die entstehenden freien Elektronen und schnellen Neutralteilchen werden nachgewiesen. Bei Variation



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 digitized 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.

der eingestrahlten Photonenergie können die relativen Wirkungsquerschnitte für die Erzeugung von Elektronen (durch Photodetachment) und von Neutralteilchen (durch Photodetachment und/oder Photodissoziation) bestimmt werden.

So wurde bei den Messungen an zweiatomigen Halogenmolekülien nur Dissoziation, d.h. nur Neutralteilchen, gemessen⁶. Bei den hier betrachteten Ionen wurde außer bei ZnH^- (s. unten) nur Photodetachment beobachtet.

Die absoluten Querschnitte können mit einer Unsicherheit von etwa $\pm 50\%$ durch Vergleichsmessungen an atomaren Ionen bestimmt werden, deren Querschnitt bekannt ist^{7, 8}.

Durch die Breite der Energieverteilung der bei jedem Meßpunkt eingestrahlten Photonen werden steile Anstiege im Wirkungsquerschnitt energetisch verschoben und abgeflacht, die experimentellen Schwellenenergien sind also zu korrigieren¹. Bei den Messungen an CaH^- ist dieser Effekt an einem Beispiel gezeigt.

Aus Intensitätsgründen wurden die meisten Messungen bei relativ großer Photonenergiebreite durchgeführt.

Ergebnisse und Diskussion

BeH^- , MgH^- , CaH^- , ZnH^-

Diese Zusammenfassung erscheint sinnvoll, da jeweils ein Atom mit einer abgeschlossenen Unterschale und ein H^- -Ion als Bestandteile des negativen Moleküls angesehen werden können, daher besitzen die Ionen ebenso wie die zugehörigen neutralen Moleküle ähnliche Elektronenkonfigurationen.

BeH^-

BeH^- hat vermutlich die Elektronenkonfiguration $\dots(2s\sigma)^2(2p\sigma)^2$ und einen $^1\Sigma^+$ -Grundzustand. Der Photodetachmentprozeß hinterläßt ein BeH -Molekül in einem $\dots(2s\sigma)^2(2p\sigma)^2\Sigma^+$ -Grundzustand. Der angeregte $A^2\Pi$ -Zustand des BeH liegt 2,5 eV^{9–11} über dem Grundzustand und ist in dem untersuchten Energiebereich nicht erreichbar.

Die Abb. 1 zeigt den gemessenen Detachmentquerschnitt. Die Berechnungen von Kenney und Simons¹² ergaben für die Elektronenaffinität von BeH Werte von 0,725 eV und 0,883 eV für zwei verschiedene Ansätze der Wellenfunktionen. Die Minima der Potentialkurven für BeH und BeH^- liegen nach diesen Rechnungen bei 2,56 bzw. 2,67 atomaren Einheiten und die Vibrationsniveaus soll-

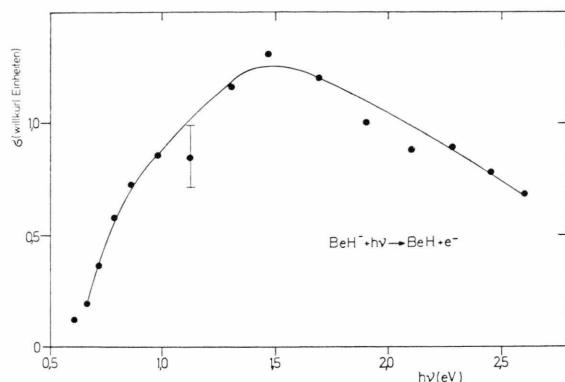


Abb. 1. Wirkungsquerschnitt für Photodetachment bei BeH^- .

ten etwa 250 meV bzw. 240 meV auseinander liegen.

Daraus kann man folgern, daß der Anstieg des Querschnittes bei 0,7 eV (korrig.) dem Einsatz des Überganges vom Grundzustand des BeH^- ($v = 0$) zum Grundzustand des BeH ($v' = 0$) entsprechen sollte, woraus sich die Elektronenaffinität EA(BeH) = $0,70 \text{ eV} \pm 0,1 \text{ eV}$ ergibt. Der relativ große Fehler von 0,1 eV soll auch mögliche nichtaufgelöste Rotationsanregung berücksichtigen.

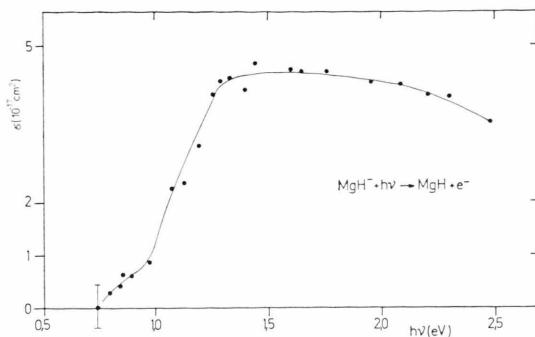
Der weitere Verlauf des Querschnittes zeigt außer einem Maximum bei etwa 1,5 eV keine signifikanten Strukturen.

MgH^-

Theoretische Berechnungen zum MgH^- -Ion sind nicht bekannt. Der Grundzustand sollte in Analogie zum isoelektronischen AlH ein $\dots(3s\sigma)^2(3p\sigma)^2^1\Sigma^+$ -Zustand sein.

MgH hat einen $\dots(3s\sigma)^2(3p\sigma)^2\Sigma^+$ -Grundzustand mit einem Gleichgewichtskernabstand $R_0 = 1,73 \text{ \AA}$ und einer Vibrationskonstanten $\omega_0 = 0,186 \text{ eV}^{13}$. Der angeregte $A^2\Pi$ -Zustand liegt 2,39 eV höher und ist bei unseren Messungen nicht erreichbar. Wenn man in Analogie zum BeH^- schließt, sollte $R_0(MgH^-)$ etwas größer und $\omega_0(MgH^-)$ etwas kleiner sein als der jeweils entsprechende Wert für das neutrale Molekül.

Abbildung 2 zeigt den experimentell bestimmten Querschnitt zwischen 0,7 eV und 2,5 eV. Nach einem Anstieg des Querschnitts ab 0,85 eV (korrig.) folgt ein zweiter größerer Anstieg ab 1,05 eV, und nach einem Maximum um 1,5 eV fällt der Querschnitt langsam zu größeren Energien ab.

Abb. 2. Photodetachmentquerschnitt bei MgH^- .

Die Differenz von 0,2 eV zwischen den Schwellen entspricht der Energie eines Schwingungsquants. Unter der Annahme, daß die meisten negativen Ionen ohne Schwingungsanregung mit $v=0$ den Stoßraum erreichen, bietet sich für den Querschnittsverlauf folgende Deutung an: Der größere Anstieg ab 1,05 eV wird durch Übergänge vom Grundzustand des Ions zum Grundzustand des Moleküls bewirkt, und zwar vorwiegend $(0,0)$ -Übergänge. Beiträge anderer Übergänge mit $\delta v = 0$ können ebenfalls dazu beitragen, da sie nach den obigen Vorbemerkungen etwa dieselbe Übergangsenergie aufweisen. Der kleinere, vorgelagerte Anstieg ab 0,85 eV wird durch Übergänge mit $\delta v = -1$ hervorgerufen, wobei der Übergang von $v=1$ nach $v'=0$ den größten Beitrag liefern sollte.

Übergänge mit $\delta v = +1$ sollten dann ab 1,24 eV (korr.) entsprechend 1,16 eV (unkorr.) einsetzen. Wegen zu geringer experimenteller Energieauflösung kann man jedoch keine Aussage über ihren

relativen Beitrag zum Querschnitt aus der Kurve ablesen.

Wenn diese Interpretation der Meßergebnisse zutrifft, dann beträgt die Elektronenaffinität $\text{EA}(\text{MgH}) = 1,05 \text{ eV} \pm 0,06 \text{ eV}$ in Übereinstimmung mit dem Wert von Gaines und Page¹⁴ von 1,08 eV.

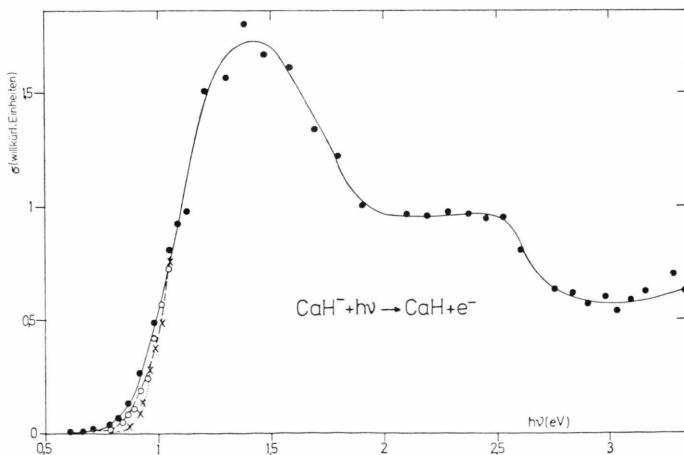
Der Absolutwert des Wirkungsquerschnittes wurde relativ zu dem Querschnitt von 0^- bei 1,84 eV bestimmt⁷.

CaH^-

Die Konfiguration für den Grundzustand von CaH^- läßt sich nach vorliegenden Daten nicht eindeutig angeben, denn für das isoelektronische Molekül ScH hat Smith¹⁵ fünf Zustände berechnet, die weniger als 0,65 eV über dem $\dots 3d\sigma, 3d\delta^3\Delta$ -Grundzustand liegen. Eine neuere Rechnung von Kunz¹⁶ zeigt ähnliche Ergebnisse. Man kann nun nicht ohne weiteres entscheiden, welcher dieser vielen Zustände im CaH^- dann der Grundzustand sein wird.

Das neutrale Molekül CaH hat einen $(4s\sigma)^2 3d\sigma^3\Sigma^+$ -Grundzustand und nach Khan⁹ liegt der erste angeregte $\dots 4p\pi A^2\Pi$ -Zustand etwa 2 eV darüber.

Abbildung 3 zeigt den gemessenen Wirkungsquerschnitt. Dazu ist zu bemerken, daß im Bereich des Anstieges um 1 eV mit verschiedenen Monochromator-Schlitzweiten von 2,5 mm, 1,5 mm und 0,5 mm gemessen wurde. Die Energiehalbwertsbreite des eingestrahlten Lichtes ist im letzten Fall wesentlich verbessert. Die oben erwähnte Verschiebung und Abflachung von steilen Anstiegen durch die experimentelle Energiebreite des Lichtes läßt sich an diesem Beispiel (s. Abb. 3) sehr deutlich erkennen.

Abb. 3. Photodetachmentquerschnitt bei CaH^- . Messungen mit unterschiedlicher Photonenergiebreite, (● 2,5 mm Schlitzweite, ○ 1,5 mm Schlitzweite, ✕ 0,5 mm Schlitz).

Wenn man den linearen Teil des Anstieges extrapoliert, erreicht man eine unkorrigierte Schwellenergie von 0,91 eV, zu der noch 0,02 eV zu addieren sind, um auf die Schlitzweite 0 mm zu extrapolieren.

Da keine Angaben über den Ionenzustand vorliegen, ist die einfachste Interpretation, den ersten Anstieg des Querschnittes dem $v=0$ nach $v'=0$ -Übergang vom Grundzustand des Ions zum Grundzustand des Moleküls zuzuordnen. Daraus ergibt sich die Elektronenaffinität $EA(CaH) = 0,93 \text{ eV} \pm 0,05 \text{ eV}$.

Für den plateauartigen Verlauf des Querschnittes zwischen 2 eV und 2,5 eV bietet sich keine einfache Erklärungsmöglichkeit an. Der sanfte Anstieg ab 3 eV könnte durch Übergänge zu einem angeregten CaH-Zustand verursacht werden. Wenn dieser Übergang zu dem oben erwähnten $A^2\Pi$ -Zustand führt, ergibt sich eine Einschränkung für die Konfiguration der möglichen Ionenzustände, denn von einer $3d\sigma$ $3d\delta$ -Grundzustandskonfiguration des Ions, die sich in Analogie zum ScH anbieten würde, wäre ein derartiger Übergang nicht zu erwarten, da gleichzeitig ein Elektron abgelöst würde und ein anderes sein Orbital ändern müßte. Danach wäre eine $(3d\sigma)^2$ -Grundzustandskonfiguration des Ions zu bevorzugen.

ZnH⁻

Im ZnH⁻-Ion ist vermutlich ein zusätzliches $4p\sigma$ -Elektron an ZnH im KLM ($4s\sigma$)² $4p\sigma$ $^2\Sigma^+$ -Grundzustand¹⁷ angelagert, so daß ein $^1\Sigma^+$ -Grundzustand des Ions resultiert. Da der erste angeregte $A^2\Pi$ -Zustand des ZnH etwa 3 eV¹⁸ über dem Grundzustand liegt, sollte der Detachmentquerschnitt als wesentlichen Anstieg nur den Einsatz des Überganges von Grundzustand zu Grundzustand aufweisen. Bemerkenswert ist jedoch, daß Herzberg¹⁷ und Gaydon¹⁹ für ZnH eine Dissoziationsenergie von nur 0,85 eV angeben. Bei einer derart kleinen Dissoziationsenergie sollte das Potentialminimum bei einem großen Wert für R_0 (ZnH) liegen. Da GaH – isoelektronisch mit ZnH⁻ – eine Dissoziationsenergie von 2,9 eV hat¹⁹, könnte ZnH⁻ eine Potentialkurve mit einem Minimum bei kleinerem Kernabstand R_0 (ZnH⁻) besitzen [d. h. R_0 (ZnH⁻) $< R_0$ (ZnH)], so daß Übergänge im Franck-Condon-Bereich nicht, – oder nur zu einem geringen Anteil – im Zustand $v'=0$ des ZnH enden. In der Abb. 4 wird schematisch ein solcher Sachverhalt dargestellt.

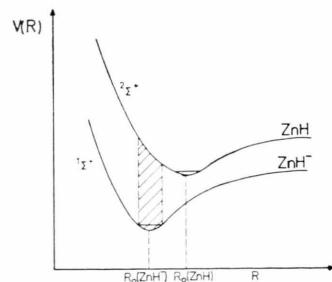


Abb. 4. Denkbare Verlauf der Potentialkurven für ZnH und ZnH⁻, Franck-Condon-Bereich schraffiert.

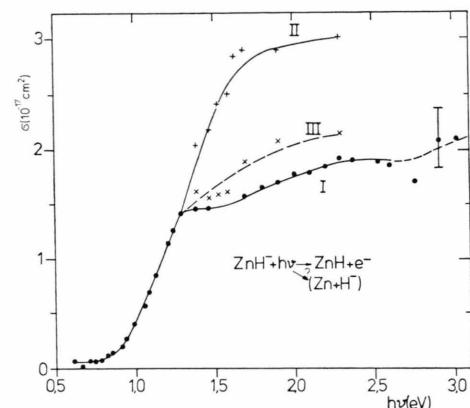


Abb. 5. Wirkungsquerschnitt für Photozerstörung bei ZnH⁻ (genaueres im Text).

Abbildung 5 zeigt den gemessenen Verlauf des Querschnittes. Nach den vorausgegangenen Bemerkungen läßt sich der Querschnitt unterhalb des Anstiegs bei 0,9 eV (unkorr.) als Übergänge von vibrationsangeregten Ionenzuständen deuten, und der Anstieg würde das Erreichen des Franck-Condon-Bereiches von $v=0$ zu $v' \neq 0$ -Zuständen des Moleküls widerspiegeln.

Für die Elektronenaffinität ergibt sich daraus eine obere Grenze $EA(ZnH) \leqq 0,95 \text{ eV}$.

Oberhalb von 1,3 eV Photonenergie waren die experimentellen Ergebnisse nicht reproduzierbar an aufeinander folgenden Tagen. Während einmal der relative Verlauf I (Abb. 5) sowohl aus dem Nachweis der Elektronen und der Neutralen bestimmt wurde, ergab sich bei anderen Messungen eine Aufspaltung der Energieabhängigkeit für die Produktion von Neutralen (Kurve II) und Elektronen (Kurve III) ab 1,3 eV. Als mögliche Ursachen für derartige Ergebnisse könnten Einflüsse von Photodissoziationsprozessen und veränderte Erzeugungsbedingungen der Ionen in Frage kommen. Der der-

zeitige geringe Kenntnisstand über die beteiligten Potentialkurven läßt noch keine eindeutige Interpretation zu.

Zusammenfassend ist zu diesen vier Hydridionen zu bemerken, daß die beteiligten Metallatome wohl keine gebundenen negativen Atomionen bilden können, während die Hydridionen jeweils (außer vielleicht bei CaH^-) eine volle σ -Elektronenschale besitzen und stabil sind. Die niederenergetische Abkömmlingswelle für Elektronen liegt um etwa 1 eV. Die angegebenen Elektronenaffinitäten sind nicht unbedingt zuverlässig, da die Interpretation der experimentellen Kurven außer bei BeH^- auf wenig abgesicherte Annahmen über die Ionenzustände gestützt ist.

B) PH^- , AsH^-

PH^-

Dieses Ion hat einen $\pi^3 \text{ } ^2\text{II}$ -Grundzustand, und nach Cade²⁰ hat PH neben dem $^3\Sigma^-$ -Grundzustand einen angeregten $^1\Delta$ -Zustand, der 0,95 eV darüber liegt.

Der gemessene Verlauf des Wirkungsquerschnittes (Abb. 6) ermöglicht eine zwanglose Zuordnung der Anstiege ab 1,0 eV (korrig.) und etwa 1,9 eV zu den Einsatzschwellen für die Übergänge vom Grundzustand des Ions zu eben diesen beiden Zuständen des Moleküls. Nach Berechnungen²¹ liegen die Minima der Potentialkurven bei folgenden Kernabständen: $R_0(\text{PH}^-) = 2,668 a_0$, $R_0(\text{PH} \ ^3\Sigma) = 2,708 a_0$ und $R_0(\text{PH} \ ^1\Delta)$ ist unbekannt.

Da die Gleichgewichtsabstände von Ion und Molekül etwa gleich groß sind, sollten vorwiegend Übergänge ohne Änderung der Vibrationsquantenzahl

$\delta v = 0$ auftreten. Diese Annahme wird durch die Messungen bestätigt, denn die Vibrationskonstante des PH -Grundzustandes beträgt 0,295 eV¹⁷, und es ist kein deutlicher Einsatz eines $\delta v = +1$ -Überganges 0,295 eV oberhalb der ersten Schwelle zu erkennen.

Die erste Schwelle ergibt eine Elektronenaffinität $\text{EA}(\text{PH}) = 1,00 \text{ eV} \pm 0,06 \text{ eV}$ in Übereinstimmung mit theoretisch abgeschätzten 0,93 eV²⁰. In der Zeit zwischen unseren Messungen²² und dieser Zusammenstellung sind Laser-Elektronen-Spektroskopie (LPES)-Messungen an PH^- ausgeführt worden²³. Sie ergaben $\text{EA}(\text{PH}) = 1,028 \text{ eV} \pm 0,010 \text{ eV}$, sowie eine Vibrationsfrequenz $\omega = (2230 \pm 100) \text{ cm}^{-1}$, einen Gleichgewichtskernabstand $1,414 \text{ \AA} \geq R_0(\text{PH}^-) \geq 1,400 \text{ \AA}$ und einen Interkombinations-Abstand $T_0(a^1\Delta) = 0,950 \text{ eV} \pm 0,010 \text{ eV}$ für PH . Diese Werte sind genauer und stimmen mit unseren Ergebnissen überein.

AsH^-

Theoretisch berechnete oder experimentelle Daten über das Molekül AsH oder das Ion AsH^- konnten nicht gefunden werden. Es sollten jedoch analoge Zustände auftreten wie bei PH und PH^- . Auch der experimentelle Photodetachmentquerschnitt (Abb. 7) weist eine starke Ähnlichkeit mit dem bei PH^- auf.

Die obigen Bemerkungen über PH^- brauchen demnach nicht wiederholt zu werden; sie sollten sinngemäß auch hier zutreffen. Ein Unterschied scheint sich darin anzudeuten, daß sich unterhalb des ersten größeren Anstieges ein flacher Ausläufer zeigt. Er könnte durch Spin-Bahn-Aufspaltung des ^2II -Ionengrundzustandes erklärt werden, ähnlich wie

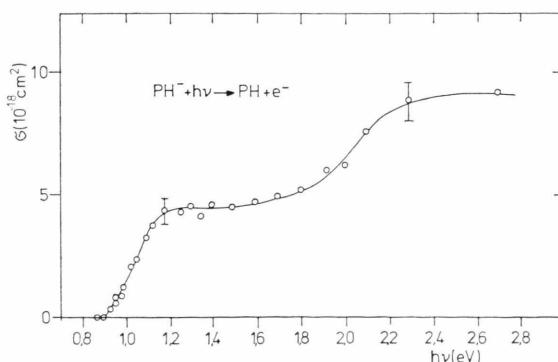


Abb. 6. Photodetachmentquerschnitt bei PH^- .

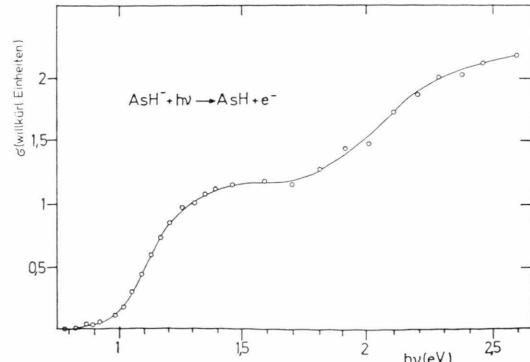


Abb. 7. Photodetachmentquerschnitt bei AsH^- .

bei den Messungen an As^- (siehe²⁴) und SeH^- (siehe²⁵). Unter den üblichen Vorbehalten, nämlich daß der erste steile Anstieg ab 1 eV dem Übergang von dem Grundzustand des Ions zu dem des Mole-

küls zuzuordnen ist, ergibt sich die Elektronenaffinität $\text{EA}(\text{AsH}) = 1,0 \text{ eV} \pm 0,1 \text{ eV}$.

Auch bei AsH liegt der erste angeregte Zustand ($a^1\Delta$) etwa 0,9 eV über dem Grundzustand.

- ¹ D. Feldmann, Z. Naturforsch. **25a**, 621 [1970].
- ² Z. B.: M. W. Siegel, R. J. Celotta, J. L. Hall, J. Levins u. R. A. Bennett, Phys. Rev. A **6**, 607, 631 [1972].
- ³ Z. B.: K. C. Smyth u. J. I. Brauman, J. Chem. Phys. **56**, 1132 [1972].
- ⁴ H. Hotop, T. A. Patterson u. W. C. Lineberger, J. Chem. Phys. **60**, 1806 [1974].
- ⁵ H. J. Kaiser, E. Heinicke, R. Rackwitz u. D. Feldmann, Z. Physik **270**, 259 [1974].
- ⁶ R. Rackwitz, D. Feldmann, E. Heinicke u. H. J. Kaiser, Z. Naturforsch. **29a**, 1797 [1974].
- ⁷ M. L. Seman u. L. M. Branscomb, Phys. Rev. **125**, 1602 [1962].
- ⁸ L. M. Branscomb, S. J. Smith u. G. Tisone, J. Chem. Phys. **43**, 2906 [1965].
- ⁹ M. A. Khan, Proc. Phys. Soc. London **80**, 593 [1962].
- ¹⁰ P. S. Bagus u. C. M. Moser, J. Chem. Phys. **58**, 1886 [1973].
- ¹¹ R. Colin u. D. De Greef, Can. J. Phys. **53**, 2142 [1975].
- ¹² J. Kenney u. J. Simons, J. Chem. Phys. **62**, 592 [1975].
- ¹³ W. J. Balfour u. W. M. Cartwright, Chem. Phys. Lett. **32**, 82 [1975].
- ¹⁴ A. F. Gaines u. F. M. Page, Trans. Faraday Soc. **62**, 3086 [1966].
- ¹⁵ R. E. Smith, Proc. Roy. Soc. London A **332**, 113 [1973].
- ¹⁶ A. B. Kunz, M. P. Guse u. R. J. Blint, J. Phys. B **8** L, 358 [1975].
- ¹⁷ G. Herzberg, Diatomic Molecules, Van Nostrand, New York 1950.
- ¹⁸ M. A. Khan, Proc. Phys. Soc. London **80**, 599 [1962].
- ¹⁹ A. G. Gaydon, Dissociation Energies, Chapman & Hall, London 1968.
- ²⁰ P. E. Cade, Can. J. Phys. **46**, 1989 [1968].
- ²¹ P. E. Cade u. W. Huo, Atomic Data **12**, 415 [1973].
- ²² H. J. Kaiser, Dissertation Univ. Heidelberg 1975.
- ²³ P. F. Zittel u. W. C. Lineberger, J. Chem. Phys. **65**, 1236 [1976].
- ²⁴ D. Feldmann, R. Rackwitz, H. J. Kaiser u. E. Heinicke, to be published.
- ²⁵ K. C. Smyth u. J. I. Brauman, J. Chem. Phys. **56**, 5993 [1972].