NOTIZEN

Die Kernquadrupol-Kopplungskonstanten des $^{69}\text{Ga}^{127}\text{J}$, $^{69}\text{Ga}^{79}\text{Br}$, $^{115}\text{In}^{79}\text{Br}$ und $^{27}\text{Al}^{79}\text{Br}$ in kritischer Sicht

Critical Examination of the Nuclear Quadrupole Coupling Constants of $^{69}\text{Ga}^{127}\text{J}$, $^{69}\text{Ga}^{79}\text{Br}$, $^{115}\text{In}^{79}\text{Br}$ and $^{27}\text{Al}^{79}\text{Br}$

PAUL MACHMER

Stuttgart

(Z. Naturforsch. 27 b, 1271 [1972]; eingegangen am 26. Juli 1972)

Halogen nuclear quadrupole coupling constants, gaseous diatomic halides of Ga, In and Al

Da die von BARRETT und MANDEL¹ bestimmte Kernquadrupol-Kopplungskonstante des ^{127}Jod in ^{69}GaJ aus der Reihe der systematisch ansteigenden $\left| \frac{(eQ)q_{\text{mol.}}}{h} \right|^{127\text{J}}$ Werte des ^{27}AlJ ², ^{115}InJ ³ und ^{205}TlJ ⁴ in auffälliger Weise herausfällt, ohne daß sich ein Grund dafür angeben läßt, ist die Vermutung nicht von der Hand zu weisen, daß BARRETTs und MANDELs¹ Angaben über GaJ revisionsbedürftig sind. In der Tat ergeben eigene Berechnungen, über deren Details anderenorts noch ausführlich berichtet werden soll, für GaJ eine Kernquadrupol-Kopplungskonstante, die mit

$$\left| \frac{(eQ)q_{\text{mol.}}}{h} \right|^{127\text{J}} = 371 \pm 18 \text{ MHz } (v=0)$$

besser zu den übrigen $\left| \frac{(eQ)q_{\text{mol.}}}{h} \right|^{127\text{J}}$ -Werten²⁻⁴ paßt (siehe Tab. I).

Die Anwendung der am Beispiel des GaJ entwickelten Rechenmethode auf $^{69}\text{Ga}^{79}\text{Br}$, $^{115}\text{In}^{79}\text{Br}$ und $^{27}\text{Al}^{79}\text{Br}$ führt zu $^{79}\text{Brom}$ -Kernquadrupol-Kopplungskonstanten, die sich im Gegensatz zu BARRETTs und

Tab. I. Daten zur Verdeutlichung der systematischen Variation von ^{127}Jod -Kernquadrupol-Kopplungskonstanten.

Verbindung	$\left \frac{(eQ)q_{\text{mol.}}}{h} \right ^{127\text{J}}$ (aus Kernquadrupol-hyperfeinstrukturen)	$\left \frac{(eQ)q_{\text{mol.}}}{h} \right ^{127\text{J}}$ (berechnet)
^{27}AlJ	$334 \pm 10 \text{ MHz}^2$	
^{69}GaJ	$549 \pm 31 \text{ MHz}^1$	$371 \pm 18 \text{ MHz } (v=0)$
^{115}InJ	$387,68 \text{ MHz}^3$	
^{205}TlJ	$438,91 \text{ MHz}^4$	

MANDELs¹ Werten in den Trend systematisch ansteigender Kernquadrupol-Kopplungskonstanten einordnen lassen (siehe Tab. II).

Tab. II. Daten zur Verdeutlichung des Trends in den $^{79}\text{Brom}$ -Kernquadrupol-Kopplungskonstanten des AlBr, GaBr, InBr und TlBr.

Verbindung	$\left \frac{(eQ)q_{\text{mol.}}}{h} \right ^{79\text{Br}}$ (aus Kernquadrupol-hyperfeinstrukturen)	$\left \frac{(eQ)q_{\text{mol.}}}{h} \right ^{79\text{Br}}$ (berechnet)
$^{27}\text{Al}^{79}\text{Br}$	$\leq 100 \text{ MHz}^2$	$97 \pm 5 \text{ MHz } (v=0)$
$^{69}\text{Ga}^{79}\text{Br}$	$134 \pm 3 \text{ MHz}^1$	$108 \pm 5 \text{ MHz } (v=0)$
$^{115}\text{In}^{79}\text{Br}$	$138 \pm 11 \text{ MHz}^1$	$111 \pm 5 \text{ MHz } (v=0)$
$^{205}\text{Tl}^{79}\text{Br}$	$126,31 \text{ MHz}^5$	

Die berechneten Kernquadrupol-Kopplungskonstanten werden hiermit zur experimentellen Prüfung vorgelegt.

Sonderdruckanforderungen an Dr. PAUL MACHMER, D-7000 Stuttgart 1, Roetestr. 57, Bundesrepublik Deutschland.

¹ A. H. BARRETT u. M. MANDEL, Physic. Rev. **109**, 1576 [1958].

² F. C. WYSE u. W. GORDY, J. chem. Physics **56**, 2133 [1972].

³ B. SCHENK, E. TIEMANN u. J. HOEFT, Z. Naturforsch. **25 a**, 1833 [1970].

⁴ D. A. STEPHENSON, J. T. DICKINSON u. J. C. ZORN, J. chem. Physics **53**, 1530 [1970].

⁵ J. T. DICKINSON, D. A. STEPHENSON u. J. C. ZORN, J. chem. Physics **53**, 1528 [1970].