

Hochauflösende
Fourier-Transform-Infrarot-Spektroskopie
der dreiatomigen Moleküle
HCP, DCP und HBS

Inaugural-Dissertation

zur

*Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften
der Justus-Liebig-Universität Gießen*

*Fachbereich 8 (Biologie, **Chemie** und Geowissenschaften)*

vorgelegt von

DIPLOM-CHEMIKER

MICHAEL JUNG

Physikalisch-Chemisches-Institut der Justus-Liebig-Universität

Gießen, 2000

D26

Dekan:

Prof. Dr. Rainer Renkawitz

I. Berichterstatter:

Prof. Dr. Manfred Winnewisser

II. Berichterstatter:

Prof. Dr. Günther Maier

INHALTSVERZEICHNIS

1	Einleitung	1
1.1	Aktuelle Publikationen zu HCP und die Bedeutung der in Giessen erarbeiteten Ergebnisse	4
1.2	Literaturverzeichnis	5
2	Datenanalyse	7
2.1	Notationen und Auswahlregeln	7
2.1.1	Zuordnung von Rotationsschwingungsübergängen	8
2.2	Bestimmung von Reihenentwicklungskonstanten	10
2.3	Bestimmung spektroskopischer Konstanten	12
2.3.1	Der effektive Hamiltonoperator und das Programm LINC	13
2.3.2	Der Aufbau von Fitprogrammen nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate	15
2.3.3	Lineare Fitprogramme	15
2.3.4	Nicht lineare Fitprogramme	16
2.3.5	Durchführung der Fits	18
2.3.6	Die Wang-Symmetrisierung	19
2.4	Literaturverzeichnis	20
3	Synthese von HCP und DCP	23
3.1	Darstellung von HCP	23
3.1.1	Durchführung der 1. Stufe: Darstellung des Kinnear-Perren Komplexes . .	23
3.1.2	Durchführung der 2. Stufe: Reduktion des Komplexsalzes zu CH_3PCl_2 . .	24
3.1.3	Durchführung der 3. Stufe: Pyrolyse von CH_3PCl_2	24
3.2	Darstellung von DCP	26
3.3	Literaturverzeichnis	28
4	FT-IR-Spektren von HCP	31
4.1	Einleitung	31
4.1.1	Fourier-Transform-Infrarot-Messungen	32
4.2	Kalibration und Genauigkeit der FT-IR-Messungen	32
4.3	Analyse und Zuordnung der HCP Spektren	32
4.3.1	Darstellung und Beschreibung der aufgenommenen FT-IR-Spektren von H^{12}CP und H^{13}CP	32
4.3.2	Reihenentwicklungskonstanten von H^{12}CP und H^{13}CP	35
4.3.3	Darstellung und Beschreibung von Q-Zweigen	35
4.3.4	Kombinierte Fits von H^{12}CP	37
4.3.5	Die Fermi-Resonanz (020)/(001) im IR-Spektrum von H^{12}CP	49

4.3.6	Die Fermi-Resonanz (030)/(011) im IR-Spektrum von H^{12}CP	50
4.3.7	Die Fermi-Resonanz (040)/(021)/(002) im IR-Spektrum von H^{12}CP . . .	52
4.3.8	Kombinierte Fits von H^{13}CP	53
4.3.9	Harmonische Wellenzahlen und Anharmonizitätskonstanten von H^{12}CP .	55
4.3.10	Fermi-Resonanzmatrixelemente von HCP	59
4.3.11	Berechnung von \tilde{G}_v -Werten der Fermi-Resonanz (040)/(021)/(002)	60
4.4	Diskussion	61
4.5	Literaturverzeichnis	63
5	FT-IR-Spektren von DCP	67
5.1	Einleitung	67
5.1.1	Fourier-Transform-Infrarot-Messungen	67
5.2	Analyse und Zuordnung der DCP-Spektren	67
5.2.1	Darstellung und Beschreibung der aufgenommenen FT-IR-Spektren . . .	67
5.2.2	Reihenentwicklungskonstanten von D^{12}CP und D^{13}CP	71
5.2.3	Darstellung und Beschreibung von Q-Zweigen des Moleküls DCP	83
5.3	Fermi-Resonanz (100)/(002) im IR-Spektrum von D^{12}CP	88
5.4	Fermi-Resonanz (110)/(012) im IR-Spektrum von D^{12}CP	92
5.5	Fermi-Resonanz (200)/(004)/(102) im IR-Spektrum von D^{12}CP	94
5.6	Fermi-Resonanz (210)/(112)/(014) im IR-Spektrum von D^{12}CP	96
5.7	Fermi-Resonanz (120)/(022) im IR-Spektrum von D^{12}CP	100
5.8	Fermi-Resonanz (101)/(003) im IR-Spektrum von D^{12}CP	100
5.9	Grund- und angeregte Zustände von D^{13}CP	101
5.10	Fermi-Resonanz (100)/(002) im IR-Spektrum von D^{13}CP	101
5.11	Reduzierte Energien und Fermi-Resonanz	101
5.12	Harmonische Wellenzahlen und Anharmonizitätskonstanten	105
5.12.1	Rotationsschwingungswechselwirkungskonstanten	108
5.12.2	Zentrifugalverzerrungskonstanten	111
5.13	Literaturverzeichnis	113
6	FT-IR- und Infrarot-Diodenlaser-Spektroskopie von HBS	115
6.1	Die Suche nach der Knickschwingung ν_2 von HBS	115
6.1.1	FT-IR-Spektroskopie von HBS	117
6.1.2	Beschreibung des Experimentes zur Darstellung und FT-IR-Messung von HBS	118
6.1.3	Analyse der FT-IR-Spektren von HBS	119
6.2	Infrarot-Diodenlaserspektroskopie an HBS	132
6.2.1	Beschreibung des Experimentes und der neu konstruierten Meßzelle . . .	132
6.2.2	Beschreibung des Diodenlaserspektrometers und der Messapparatur . . .	137
6.3	Darstellung und spektroskopischer Nachweis von HBO	140
6.4	FT-IR-Spektren von Dichlorboran (HBCl_2)	141
6.5	Literaturverzeichnis	146
7	Hochtemperaturöfen mit Heizelementen aus MoSi_2	147
7.1	Entwurf A für die Konstruktion eines Hochtemperaturofens	147
7.2	Entwurf B für die Konstruktion eines Hochtemperaturofens	151
7.3	Faserwärmeisolierung	154
7.4	Dimensionierung und Kostenrechnung für einen Ofeneigenbau	155

7.5	Der verwendete, kommerziell erhältliche Ofen	156
7.6	Elektronische Regelung	156
7.6.1	Programm zur Temperaturregelung des Hochtemperaturofens	158
7.7	Literaturverzeichnis	159
8	FT-IR-Emissionsspektroskopie an HBS und HCP	161
8.1	FT-IR-Emissionsspektroskopie an HBS	161
8.2	FT-IR-Emissionsspektroskopie an HCP	163
8.2.1	Beschreibung von Q-Zweigen des FT-IR Emissionsspektrum von HCP . .	164
8.3	Literaturverzeichnis	171
9	Zusammenfassung	173
	Anhang	175
A	Danksagung	177
B	Lebenslauf	179
C	Zusammenstellung der gemessenen und berechneten FT-IR-Spektren.	181
D	FT-IR-Infrarotspektren von H^{12}CP und H^{13}CP	185
A	HCP-Spektrum im Bereich $1250 - 1500 \text{ cm}^{-1}$	185
B	HCP-Spektrum im Bereich $2470 - 2770 \text{ cm}^{-1}$	191
C	HCP-Spektrum im Bereich $3100 - 3400 \text{ cm}^{-1}$	198
E	FT-IR-Infrarotspektren von D^{12}CP und D^{13}CP	205
A	DCP-Spektrum im Bereich $400 - 600 \text{ cm}^{-1}$	205
B	DCP- und HCP-Spektrum im Bereich $600 - 800 \text{ cm}^{-1}$	214
C	DCP-Spektrum im Bereich $2170 - 2600 \text{ cm}^{-1}$	219
D	DCP-Spektrum im Bereich $3460 - 3800 \text{ cm}^{-1}$	227
E	DCP-Spektrum im Bereich $4730 - 5200 \text{ cm}^{-1}$	235
F	DCP-Spektrum im Bereich $5380 - 5870 \text{ cm}^{-1}$	245
F	HCP-Emissions-Spektrum im Bereich von $450 - 900 \text{ cm}^{-1}$	257
G	FT-IR-Infrarotspektren von HBS	267
A	HBS-Spektrum im Bereich $1100 - 1300 \text{ cm}^{-1}$	267
B	HBS-Spektrum im Bereich $2310 - 2790 \text{ cm}^{-1}$	272
H	Listen der Kalibrationslinien	283
A	Kalibrationslinien zu HCP	283
B	Kalibrationslinien zu DCP	288
C	Kalibrationslinien zu HBS	291
I	Linienlisten von H^{12}CP, H^{13}CP	293
A	Tabellen zu HCP	293
B	Tabellen zu H^{13}CP	310

J	Linienlisten von $D^{12}CP$, $D^{13}CP$	315
A	Tabellen zu DCP	315
B	Tabellen zu $D^{13}CP$	343
K	Linienlisten von HBS	349
A	Tabellen zu $H^{11}B^{32}S$	349
B	Tabellen zu $H^{10}B^{32}S$	353
C	Tabelle zu $H^{11}B^{34}S$	356
D	Tabelle zu $H^{10}B^{34}S$	357
E	Tabelle zu $H^{11}B^{33}S$	357
L	Computer Programme	359
A	MCFermi.f	359
B	OMEGA.NB	366
C	ALPHA.NB	367
D	BETA.NB	368

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

3.1	Syntheschema von HCP	23
3.2	Schematische Darstellung der Pyrolyse von CH_3PCl_2 bei 1173 K zu HCP	25
3.3	Schematische Darstellung der Entfernung von CO_2 aus HCP-Proben	26
3.4	Syntheschema von DCP	27
4.1	Ausschnitt aus dem Termniveaudiagramm von H^{12}CP und H^{13}CP	34
4.2	Übersicht des HCP FT-IR-Spektrums von $600\text{--}700\text{ cm}^{-1}$	38
4.3	Übersicht des HCP FT-IR-Spektrums von $1200\text{--}1500\text{ cm}^{-1}$	39
4.4	Übersicht des HCP FT-IR-Spektrums von $2475\text{--}2675\text{ cm}^{-1}$	40
4.5	Übersicht des HCP FT-IR-Spektrums von $3100\text{--}3400\text{ cm}^{-1}$	41
4.6	Zusammenstellung der Q-Zweige des ν_2 Bandensystems von H^{12}CP	45
4.7	Fortsetzung der Q-Zweige des ν_2 Bandensystems von H^{12}CP und H^{13}CP	46
4.8	Übersicht der zugeordneten Q-Zweige $(040)^{2\text{e,f}} \leftarrow (030)^{1\text{e,f}}$ und $(040)^{0\text{e}} \leftarrow (030)^{1\text{f}}$	47
4.9	Effekt der Fermi-Resonanz auf die Termwerte der Niveaus $(020)/(001)$ von HCP	62
5.1	Ausschnitt aus dem Termniveaudiagramm von D^{12}CP	68
5.2	Übersicht des DCP FT-IR-Spektrums von $470\text{--}780\text{ cm}^{-1}$	72
5.3	Übersicht des DCP FT-IR-Spektrums von $2220\text{--}2580\text{ cm}^{-1}$	73
5.4	Übersicht des DCP FT-IR-Spektrums von $2220\text{--}2580\text{ cm}^{-1}$	74
5.5	Übersicht des DCP FT-IR-Spektrums von $3500\text{--}3950\text{ cm}^{-1}$	75
5.6	Übersicht des DCP FT-IR-Spektrums von $3500\text{--}3950\text{ cm}^{-1}$	76
5.7	Übersicht des DCP FT-IR-Spektrums von $4720\text{--}5020\text{ cm}^{-1}$	77
5.8	Übersicht des DCP FT-IR-Spektrums von $4720\text{--}5020\text{ cm}^{-1}$	78
5.9	Übersicht des DCP FT-IR-Spektrums von $5390\text{--}5690\text{ cm}^{-1}$	79
5.10	Übersicht von Q-Zweigen aus dem ν_2 Bandensystem des Moleküls DCP	84
5.11	Übersicht von Q-Zweigen aus dem ν_2 Bandensystem des Moleküls DCP.	85
5.12	Übersicht von Q-Zweigen aus dem ν_2 Bandensystem des Moleküls DCP.	86
5.13	Übersicht von Q-Zweigen aus dem ν_2 Bandensystem des Moleküls DCP.	87
5.14	Effekt der Fermi-Resonanz auf die Vibrationstermwerte verschiedener Niveaus	90
5.15	Absorptionsgrad α von Übergängen der Fermi-Resonanzsysteme	91
5.16	Ausschnitt aus dem Termniveaudiagramm von D^{13}CP	102
5.17	Auftragung reduzierter Energien von Übergängen der Fermi-Resonanzsysteme	104
6.1	Darstellung der bestimmten Termwerte von HBS	116
6.2	Zusammenstellung der Übersichts-FT-IR-Spektren der ν_3 und ν_1 von HBS	122
6.3	Ausschnitt aus dem FT-IR-Spektrum ZTGHBSFS.1 von HBS von $1110\text{--}1150\text{ cm}^{-1}$	123
6.4	Ausschnitt aus dem FT-IR-Spektrum von HBS von $1150\text{--}1170\text{ cm}^{-1}$	124
6.5	Ausschnitt aus dem FT-IR-Spektrum von HBS von $1170\text{--}1190\text{ cm}^{-1}$	125
6.6	Ausschnitt aus dem FT-IR-Spektrum von HBS von $1190\text{--}1210\text{ cm}^{-1}$	126

6.7	Ausschnitt aus dem FT-IR-Spektrum von HBS von 1210–1230 cm^{-1}	127
6.8	Ausschnitt aus dem FT-IR-Spektrum von HBS von 1230–1260 cm^{-1}	128
6.9	Vergleich des Absorptionsgrads α von P- und R-Zweig Linien	129
6.10	Darstellung der Meßzelle der Hochtemperaturmessungen	132
6.11	Ausschnitt aus dem Infrarotspektrums von HBS (900 °C)	134
6.12	Ausschnitt aus dem FT-IR-Spektrum von HBS	135
6.13	Ausschnitt aus dem Infrarotspektrums von HBS (740 °C)	135
6.14	Fotografie eines KBr-Fensters nach mehrtägigem Einsatz	136
6.15	Beschreibung des Edelstahlflansches	136
6.16	Diodenlaserspektrometer Übersicht	137
6.17	Diodenlaserspektrometer mit beheizter Meßzelle	138
6.18	Beheizte Meßzelle mit Vakuumsystem.	138
6.19	Kühl- und Flanschsystem (rechts) der Meßzelle	139
6.20	Kühl- und Flanschsystem (links) der Meßzelle	139
6.21	FT-IR-Absorptionsspektrum von HBCl_2 im Bereich von 800–3200 cm^{-1}	143
6.22	FT-IR-Absorptionsspektrum von HBCl_2 der ν_6 und ν_5	144
6.23	FT-IR-Absorptionsspektrum der ν_1 von HBCl_2	145
7.1	Entwurf A. Frontalansicht des Ofens	148
7.2	Entwurf A. Sicht auf die Ofendecke	149
7.3	Entwurf A. Seitenansicht des Ofens	149
7.4	Entwurf A und B. Heizelement Einbau mit Durchführungssteinen	150
7.5	Entwurf A und B. Heizelement-Schaltung in Reihe über Aluminiumbänder	151
7.6	Entwurf B. Sicht auf die Ofendecke	152
7.7	Entwurf B. Anordnung der Heizelemente parallel zu beheiztem Rohr	152
7.8	Entwurf B. Frontalansicht auf die Öffnung des Röhrenofens	153
7.9	Prinzipieller Sandwichaufbau der Isolierung eines Hochtemperaturofens	154
7.10	Leistungsberechnung eines fasersolierten Ofens	155
7.11	Zeichnung des Ofens von MUT	157
7.12	Schaltplan der Heizlast des Ofens von MUT	158
7.13	Programm STEUER zum Regeln des Hochtemperaturofens von MUT	159
8.1	Schematischer Aufbau des Emissionsexperimentes	162
8.2	Übersicht von Q-Zweigen des ν_2 Bandensystems von HCP in Emission	165
8.3	Übersicht von Q-Zweigen des ν_2 Bandensystems von HCP in Emission und Transmission	166
8.4	Übersicht von Q-Zweigen des ν_2 Bandensystems von HCP in Emission und Transmission	167
8.5	Übersicht von Q-Zweigen des ν_2 Bandensystems von HCP in Emission und Transmission	168
C.1	Schematischer Aufbau des FT-IR-Spektrometers IFS 120 HR von Bruker.	183

TABELLENVERZEICHNIS

2.1	Symmetrieklassifizierung der Rotationsschwingungsniveaus	20
4.1	Zusammenstellung der Bedingungen für die FT-IR-Messungen von HCP.	33
4.2	Interne Kalibration der FT-IR-Messungen von HCP.	33
4.3	Reihenentwicklungskonstanten in $J(J+1)$ für P, R-Subbanden von H^{12}CP . . .	42
4.4	Reihenentwicklungskonstanten in $J(J+1)$ für Q-Zweige von H^{12}CP	43
4.5	Reihenentwicklungskonstanten in $J(J+1)$ für P, R-Subbanden von H^{13}CP . . .	44
4.6	Reihenentwicklungskonstanten in $J(J+1)$ für Q-Zweige von H^{13}CP	44
4.7	\tilde{G}_c -Werte von H^{12}CP und H^{13}CP	47
4.8	Konstanten des effektiven Hamiltonoperators von H^{12}CP	48
4.9	Effektive Konstanten Fermi-Resonanz (040)/(021)/(002) für HCP	54
4.10	Konstanten des effektiven Hamiltonoperators von H^{13}CP	55
4.11	Termwerte der Fermi-Resonanz-Triade (040) ⁰ /(021) ⁰ /(002) ⁰	57
4.12	Vibrationstermwerte \tilde{G}_v von H^{12}CP	58
4.13	Harmonische Wellenzahlen und Anharmonizitätskonstanten von H^{12}CP	58
4.14	Rotationsvibrationstermwerte \tilde{G}_v von H^{12}CP nach Gleichung (4.17) berechnet . .	60
4.15	Rotationsschwingungs-Wechselwirkungskonstanten von H^{12}CP	61
4.16	Gegenüberstellung von \tilde{B}_v -Werten mit berechneten Rotationskonstanten \tilde{B}_v^{calc} . .	61
5.1	Zusammenstellung der Bedingungen für die FT-IR-Messungen von DCP	69
5.2	Interne Kalibration der FT-IR-Messungen von DCP	69
5.3	\tilde{G}_c , berechnet als gewichteter Mittelwert aus den Tabellen 5.4–5.7	71
5.4	Reihenentwicklungskonstanten in $J(J+1)$ für P- und R-Subbanden von DCP . .	80
5.5	Reihenentwicklungskonstanten in $J(J+1)$ für Q-Zweige von D^{12}CP	81
5.6	Reihenentwicklungskonstanten in $J(J+1)$ für P- und R-Subbanden von D^{13}CP .	82
5.7	Reihenentwicklungskonstanten in $J(J+1)$ für Q-Zweige von D^{13}CP	82
5.8	Konstanten des Hamiltonoperators für D^{12}CP von ν_2 und ν_3	89
5.9	Außerdiagonalelemente des Fermi-Resonanzsystems (100)/(002)	92
5.10	Konstanten des Hamiltonoperators für die Fermi-Resonanz (100)/(002)	93
5.11	Konstanten des Hamiltonoperators für die Fermi-Resonanz (110)/(012)	94
5.12	Konstanten des Hamiltonoperators für die Fermi-Resonanz (200)/(004)/(102) . .	96
5.13	Konstanten des Hamiltonoperators für die Fermi-Resonanz (200)/(004)/(102) . .	97
5.14	Konstanten des Hamiltonoperators für die Fermi-Resonanz (210)/(112)/(014) . .	99
5.15	Konstanten des Hamiltonoperators von D^{12}CP für (120)	100
5.16	Konstanten des Hamiltonoperators von D^{13}CP	101
5.17	Konstanten des Hamiltonoperators für D^{13}CP der Fermi-Resonanz (100)/(002) .	102
5.18	\tilde{G}_v^{exp} -Werte von D^{12}CP	107
5.19	Harmonische Wellenzahlen und anharmonische Konstanten von D^{12}CP	107

5.20	Rotationsvibrationstermwerte \tilde{G}_v von $D^{12}CP$	109
5.21	\tilde{B}_v^{exp} -Werte von $D^{12}CP$	112
5.22	Rotationsschwingungs-Wechselwirkungskonstanten von $D^{12}CP$	112
5.23	Zentrifugalverzerrungskonstanten von $D^{12}CP$	113
5.24	Vergleich von \tilde{D}_v^{exp} und \tilde{D}_v^{calc} -Werten von $D^{12}CP$	113
6.1	Observierte und berechnete Bandenzentren von HCN nach TURNER und MILLS .	117
6.2	Observierte und berechnete Bandenzentren von HBS nach TURNER und MILLS .	117
6.3	Zusammenstellung der FT-IR-Meßbedingungen von HBS	118
6.4	Reihenentwicklungskonstanten in $J(J+1)$ für P-, R-Subbanden von HBS	130
6.5	Konstanten des effektiven Hamiltonoperators von $H^{11}B^{32}S$	131
6.6	Observierte und berechnete Bandenzentren von HBO	140
6.7	Experimentelle Bedingungen der FT-IR-Messungen von $HBCl_2$	142
7.1	Technische Daten der Keramikfaserisolation	154
7.2	Hochtemperaturofen, Kosten eines Eigenbaus	156
7.3	Technische Daten des Hochtemperaturofen	156
8.1	Experimentelle Bedingungen der FT-IR-Messungen von HCP in Emission	170
A.1	CO_2 Kalibrationslinien zum Spektrum ZTGHCPXS.1.	283
A.2	H_2O Kalibrationslinien zum Spektrum ZTGHCPGX.1.	284
A.3	H_2O Kalibrationslinien zum Spektrum ZTGHCPFX.1.	284
A.4	OCS Kalibrationslinien zum Spektrum ZTHCPK.1.	285
A.5	OCS Kalibrationslinien zum Spektrum ZTGHCPHX.1.	286
A.6	OCS Kalibrationslinien zum Spektrum ZTGHCPHX.1.	287
B.7	CO_2 Kalibrationslinien zum Spektrum ZTDCPM.1.	288
B.8	CO Kalibrationslinien zum Spektrum TDCPAS.1.	288
B.9	CO Kalibrationslinien zum Spektrum TDCPBS.1.	289
B.10	H_2O Kalibrationslinien zum Spektrum ZTDCPGS.1.	289
B.11	H_2O Kalibrationslinien zum Spektrum ZTDCPFS.1.	290
B.12	H_2O Kalibrationslinien zum Spektrum ZTDCPDS.1.	290
B.13	H_2O Kalibrationslinien zum Spektrum ZTDCPIS.1.	290
C.14	H_2O Kalibrationslinien zum Spektrum ZTGHBSCS.1.	291
C.15	H_2O Kalibrationslinien zum Spektrum ZTGHBSFS.1.	291
A.1	Linienliste $H^{12}CP$ $(010)^{1e,f} \leftarrow (000)^{0e}$	293
A.2	Linienliste $H^{12}CP$ $(020)^{0e} \leftarrow (010)^{1e,f}$	294
A.3	Linienliste $H^{12}CP$ $(020)^{2e,f} \leftarrow (010)^{1e}$	295
A.4	Linienliste $H^{12}CP$ $(020)^{2e,f} \leftarrow (010)^{1f}$	296
A.5	Linienliste $H^{12}CP$ $(030)^{1e,f} \leftarrow (020)^{0e}$	297
A.6	Linienliste $H^{12}CP$ $(030)^{1e,f} \leftarrow (020)^{2f}$	297
A.7	Linienliste $H^{12}CP$ $(030)^{1e,f} \leftarrow (020)^{2e}$	298
A.8	Linienliste $H^{12}CP$ $(030)^{3e,f} \leftarrow (020)^{2e}$	298
A.9	Linienliste $H^{12}CP$ $(030)^{3e,f} \leftarrow (020)^{2f}$	299
A.10	Linienliste $H^{12}CP$ $(040)^{0e} \leftarrow (030)^{1f}$	300
A.11	Linienliste $H^{12}CP$ $(040)^{2e} \leftarrow (030)^{1f}$	300
A.12	Linienliste $H^{12}CP$ $(040)^{2f} \leftarrow (030)^{1e}$	300
A.13	Linienliste $H^{12}CP$ $(040)^{4e} \leftarrow (030)^{3e,f}$	301

A.14	Linienliste $H^{12}CP$ $(040)^{0e} \leftarrow (020)^{0e}$	301
A.15	Linienliste $H^{12}CP$ $(040)^{2e} \leftarrow (020)^{2e}$	302
A.16	Linienliste $H^{12}CP$ $(002)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	302
A.17	Linienliste $H^{12}CP$ $(021)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	303
A.18	Linienliste $H^{12}CP$ $(021)^{2e} \leftarrow (011)^{1e}$	303
A.19	Linienliste $H^{12}CP$ $(021)^{2f} \leftarrow (011)^{1f}$	304
A.20	Linienliste $H^{12}CP$ $(011)^{1e,f} \leftarrow (001)^{0e}$	304
A.21	Linienliste $H^{12}CP$ $(011)^{1e} \leftarrow (010)^{1e}$	305
A.22	Linienliste $H^{12}CP$ $(011)^{1f} \leftarrow (010)^{1f}$	305
A.23	Linienliste $H^{12}CP$ $(020)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	306
A.24	Linienliste $H^{12}CP$ $(030)^{1e,f} \leftarrow (010)^{1e}$	307
A.25	Linienliste $H^{12}CP$ $(030)^{1e,f} \leftarrow (010)^{1f}$	307
A.26	Linienliste $H^{12}CP$ $(001)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	308
A.27	Linienliste $H^{12}CP$ $(100)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	308
A.28	Linienliste $H^{12}CP$ $(110)^{1e} \leftarrow (010)^{1e}$	309
A.29	Linienliste $H^{12}CP$ $(110)^{1f} \leftarrow (010)^{1f}$	310
B.1	Linienliste $H^{13}CP$ $(010)^{1e,f} \leftarrow (000)^{0e}$	310
B.2	Linienliste $H^{13}CP$ $(020)^{0e} \leftarrow (010)^{1e,f}$	311
B.3	Linienliste $H^{13}CP$ $(020)^{2e} \leftarrow (010)^{1f}$	312
B.4	Linienliste $H^{13}CP$ $(020)^{2e,f} \leftarrow (010)^{1e}$	312
B.5	Linienliste $H^{13}CP$ $(020)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	313
B.6	Linienliste $H^{13}CP$ $(100)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	313
A.1	Linienliste $D^{12}CP$ $(010)^{1e,f} \leftarrow (000)^{0e}$	315
A.2	Linienliste $D^{12}CP$ $(020)^{0e} \leftarrow (010)^{1e,f}$	316
A.3	Linienliste $D^{12}CP$ $(020)^{2e,f} \leftarrow (010)^{1e}$	317
A.4	Linienliste $D^{12}CP$ $(020)^{2e,f} \leftarrow (010)^{1f}$	318
A.5	Linienliste $D^{12}CP$ $(030)^{1e,f} \leftarrow (020)^{0e}$	319
A.6	Linienliste $D^{12}CP$ $(030)^{1e,f} \leftarrow (020)^{2e}$	320
A.7	Linienliste $D^{12}CP$ $(030)^{1e,f} \leftarrow (020)^{2f}$	321
A.8	Linienliste $D^{12}CP$ $(030)^{3e,f} \leftarrow (020)^{2e}$	322
A.9	Linienliste $D^{12}CP$ $(030)^{3e,f} \leftarrow (020)^{2f}$	323
A.10	Linienliste $D^{12}CP$ $(040)^{0e} \leftarrow (030)^{1e,f}$	324
A.11	Linienliste $D^{12}CP$ $(040)^{2e,f} \leftarrow (030)^{1f}$	324
A.12	Linienliste $D^{12}CP$ $(040)^{2e,f} \leftarrow (030)^{1e}$	325
A.13	Linienliste $D^{12}CP$ $(040)^{4e} \leftarrow (030)^{3e,f}$	325
A.14	Linienliste $D^{12}CP$ $(040)^{4f} \leftarrow (030)^{3e,f}$	326
A.15	Linienliste $D^{12}CP$ $(040)^{2e} \leftarrow (030)^{3e,f}$	327
A.16	Linienliste $D^{12}CP$ $(040)^{2f} \leftarrow (030)^{3e,f}$	328
A.17	Linienliste $D^{12}CP$ $(011)^{1e,f} \leftarrow (001)^{0e}$	328
A.18	Linienliste $D^{12}CP$ $(001)^{0e} \leftarrow (010)^{1e,f}$	329
A.19	Linienliste $D^{12}CP$ $(011)^{1e,f} \leftarrow (020)^{0e}$	330
A.20	Linienliste $D^{12}CP$ $(110)^{1e} \leftarrow (010)^{1e}$	330
A.21	Linienliste $D^{12}CP$ $(110)^{1f} \leftarrow (010)^{1f}$	331
A.22	Linienliste $D^{12}CP$ $(012)^{1e} \leftarrow (010)^{1e}$	332
A.23	Linienliste $D^{12}CP$ $(012)^{1f} \leftarrow (010)^{1f}$	333
A.24	Linienliste $D^{12}CP$ $(002)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	334

A.25	Linienliste	$D^{12}CP (100)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	335
A.26	Linienliste	$D^{12}CP (200)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	336
A.27	Linienliste	$D^{12}CP (102)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	337
A.28	Linienliste	$D^{12}CP (004)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	338
A.29	Linienliste	$D^{12}CP (120)^{0e} \leftarrow (020)^{0e}$	339
A.30	Linienliste	$D^{12}CP (120)^{2e} \leftarrow (020)^{2e}$	340
A.31	Linienliste	$D^{12}CP (120)^{2f} \leftarrow (020)^{2f}$	340
A.32	Linienliste	$D^{12}CP (210)^{1e} \leftarrow (010)^{1e}$	341
A.33	Linienliste	$D^{12}CP (210)^{1f} \leftarrow (010)^{1f}$	341
A.34	Linienliste	$D^{12}CP (014)^{1e} \leftarrow (010)^{1e}$	342
A.35	Linienliste	$D^{12}CP (014)^{1f} \leftarrow (010)^{1f}$	342
B.1	Linienliste	$D^{13}CP (010)^{1e,f} \leftarrow (000)^{0e}$	343
B.2	Linienliste	$D^{13}CP (020)^{0e} \leftarrow (010)^{1e,f}$	344
B.3	Linienliste	$D^{13}CP (020)^{2e} \leftarrow (010)^{1e,f}$	345
B.4	Linienliste	$D^{13}CP (020)^{2f} \leftarrow (010)^{1e,f}$	346
B.5	Linienliste	$D^{13}CP (002)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	347
B.6	Linienliste	$D^{13}CP (100)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	347
A.1	Linienliste	$H^{11}B^{32}S (001)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	349
A.2	Linienliste	$H^{11}B^{32}S (002)^{0e} \leftarrow (001)^{0e}$	350
A.3	Linienliste	$H^{11}B^{32}S (011)^{1f} \leftarrow (010)^{1f}$	350
A.4	Linienliste	$H^{11}B^{32}S (011)^{1e} \leftarrow (010)^{1e}$	351
A.5	Linienliste	$H^{11}B^{32}S (100)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	352
B.6	Linienliste	$H^{10}B^{32}S (001)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	353
B.7	Linienliste	$H^{10}B^{32}S (011)^{1f} \leftarrow (010)^{1f}$	354
B.8	Linienliste	$H^{10}B^{32}S (011)^{1e} \leftarrow (010)^{1e}$	354
B.9	Linienliste	$H^{10}B^{32}S (100)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	355
C.10	Linienliste	$H^{11}B^{34}S (001)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	356
D.11	Linienliste	$H^{10}B^{34}S (001)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	357
E.12	Linienliste	$H^{11}B^{33}S (001)^{0e} \leftarrow (000)^{0e}$	357