

## Kurzzusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit Synthese und Nachweis von unbekanntem Molekülen und Ionen in der Gasphase. Um einen späteren interstellaren Nachweis dieser Moleküle und Ionen zu ermöglichen, werden sie im Labor anhand ihres Rotationspektrums identifiziert. Die Synthese der gesuchten Moleküle und Ionen erfolgt in einer Radiofrequenz-Entladung. Neben Synthese und *in situ* Rotationspektroskopie werden quantenchemische Rechnungen auf hohem Niveau durchgeführt, um die Zuordnung der gemessenen Rotationsübergänge zu ermöglichen. Diese Arbeit demonstriert die Machbarkeit der oben beschriebenen Vorgehensweise.

Zunächst wird gezeigt, dass die *in situ* Rotationspektren, die von durch Radiofrequenz-Entladung erzeugtem DSOD gemessen werden, auf Basis von quantenchemischen Rechnungen von Prof. J. Gauß zugewiesen werden können. Insgesamt werden dazu über 180 Rotationsübergänge von DSOD im Frequenzbereich zwischen 75 und 655 GHz gemessen und zugeordnet. Die gemessenen Linien stammen größtenteils aus den  ${}^rQ_0$ -,  ${}^rQ_2$ - und  ${}^rQ_3$ -Zweigen des Moleküls.

Darüber hinaus zeigen zwei Serien eigener quantenchemischer Rechnungen auf CCSD(T)/cc-p(C)VXZ Niveau (einschließlich anharmonischer Frequenzberechnungen) Leistungsfähigkeit und Genauigkeit dieser Methode. Rechnungen werden dabei einerseits an den ungeladenen Molekülen SiS, H<sub>2</sub>SiS, (H<sub>2</sub>SiS)<sub>2</sub>, HSN, HNS und andererseits an den Ionen HS<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>S<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>S<sub>2</sub><sup>+</sup> durchgeführt. Ein Vergleich der berechneten Molekülparameter mit gerechneten und insbesondere experimentellen Literaturwerten zeigt, dass die Qualität der Rechnungen für die Zuordnung von gemessenen Rotationspektren ausreicht.

Schließlich werden anhand einer systematischen Untersuchung der Radiofrequenz-Entladung von Wasser und Schwefelwasserstoff Potenzial und Vielseitigkeit dieser Methode zur Erzeugung unbekannter Moleküle und insbesondere Ionen demonstriert. Hierzu werden Wasser, Schwefelwasserstoff und ein Gemisch aus beiden (bzw. deren deuterierte Isotopomere) bei jeweils unterschiedlichen RF-Leistungen entladen und das erzeugte Plasma mit einem sog. Plasma Prozess Monitor untersucht. Die

erhaltenen Ionenmassenspektren zeigen eine große Zahl interessanter und teilweise unbekannter mehratomiger Ionen wie:  $\text{H}_5\text{O}_2^+$ ,  $\text{H}_7\text{O}_3^+$ ,  $\text{H}_2\text{S}_x^+$ ,  $\text{H}_3\text{S}_x^+$  mit  $x \leq 5$ .