

Kurzzusammenfassung

Thema dieser Arbeit ist die hochauflösende Spektroskopie im Terahertzbereich, mit dem Ziel, durch eine quantenmechanische Analyse der Spektren Molekülparameter abzuleiten. Diese sind die Grundvoraussetzung für exakte Frequenzvorhersagen und damit für die astronomische Detektion noch nicht entdeckter Moleküle. Bei den hier vorgestellten Spektralanalysen wurden zwei verschiedene Spektrometer verwendet:

- Das neu entworfene Supersonic Jet Spectrometer for Terahertz Applications (SuJeSTA) zur Untersuchung von kalten Radikalen und Ionen
- Das Kölner Terahertz Spektrometer

Die reinen Rotationsspektren von fünf Isotopomeren des Kaliumchlorids, $^{39}\text{K}^{35}\text{Cl}$, $^{39}\text{K}^{37}\text{Cl}$, $^{41}\text{K}^{35}\text{Cl}$, $^{41}\text{K}^{37}\text{Cl}$ und $^{40}\text{K}^{35}\text{Cl}$, wurden mit dem etablierten Kölner Terahertz Spektrometer aufgenommen. Dafür wurde eine spezielle Verdampferzelle in das bereits vorhandene Spektrometer integriert, um den Feststoff KCl in die Gasphase zu bringen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden insgesamt 295 neue Rotationslinien im Frequenzbereich von 170 bis 930 GHz gemessen. Für die Isotopomere $^{39}\text{K}^{35}\text{Cl}$ und $^{39}\text{K}^{37}\text{Cl}$ wurden 107 bzw. 82 Rotationsübergänge, beginnend im Vibrationsgrundzustand bis zum siebten angeregten Zustand, aufgenommen ($\nu \leq 7$). Dabei lag die höchste J -Quantenzahl bei 127 bzw. 129. Von den selteneren Isotopomeren $^{41}\text{K}^{35}\text{Cl}$ und $^{41}\text{K}^{37}\text{Cl}$ wurden 104 Linien gemessen, bei denen $J \leq 128$ und $\nu \leq 6$ bzw. $J \leq 131$ und $\nu \leq 5$ waren. Zwei Linien konnten dem $^{40}\text{K}^{35}\text{Cl}$ zugeordnet werden, dessen natürliche Häufigkeit nur 0,01% von der des $^{39}\text{K}^{35}\text{Cl}$ beträgt. Die gemessenen Linien dieser Arbeit und die Ergebnisse aus früheren Millimeter-Wellen-Untersuchungen wurden gemeinsam zu einem verbesserten Parametersatz für die untersuchten Isotopomere angepasst. Eine zusätzliche isotopeninvariante Analyse der Daten ergab die massenunabhängigen Dunham-Parameter U_{ij} und die Born-Oppenheimer-Korrektur erster Ordnung Δ_{01} . Der verbesserte und ergänzte Parametersatz ermöglicht exakte Frequenzvorhersagen im Terahertzbereich. Strukturparameter, wie der Bindungsabstand und das Trägheitsmoment, konnten aus den spektroskopischen Parametern abgeleitet werden.

Einer der Schwerpunkte dieser Arbeit war die Konstruktion und der Zusammenbau des neuen Kölner „Supersonic Jet Spectrometers for Terahertz Applications“ (SuJeSTA). Es dient zur Aufnahme der Spektren von Radikalen und Ionen, die einer gepulsten Entladungsquelle entstammen und in einer anschließenden Überschall-Expansion adiabatisch gekühlt werden. In dieser Arbeit wurde SuJeSTA zu einer umfassenden Untersuchung des linearen $X^2\Pi$ Propynylidyne Radikales ($I - C_3H$) eingesetzt. Man vermutet, dass es eine wichtige Rolle bei der Bildung von Kohlenstoffketten im ISM spielt. Aus diesem Grund war und ist es Gegenstand astronomischer Beobachtungen und Laboruntersuchungen. Mit SuJeSTA wurden erstmals Übergänge der ν_4 ($^2\Sigma^u$) CCH -Knickschwingung gemessen. Aufgrund des starken Renner-Teller-Effekts liegt die Knickschwingung im Submillimeter-Wellenlängenbereich. Acht gemessene Linien konnten Vibrationsübergängen zwischen dem Grundzustand ($^2\Pi$) und dem ersten angeregten Zustand $\nu_4 = 1$ ($^2\Sigma^u$) zugeordnet werden. Weiterhin wurde das reine Rotationsspektrum von C_3H bis 600 GHz untersucht und der Bereich der gemessenen Übergänge damit erweitert. Insgesamt konnten 43 reine Rotationsübergänge in den Vibrationsgrundzuständen ($^2\Pi_{1/2}$, $^2\Pi_{3/2}$) und im ersten angeregten Zustand $\nu_4 = 1$ ($^2\Sigma^u$) gemessen werden. Der neue Parametersatz aus einem „Least Squares Fit“ ermöglicht verlässliche Frequenzvorhersagen bis zu 1 THz.

Mit dem neuen Spektrometer war es ebenfalls möglich, Ionen in der gepulsten Entladungsquelle zu erzeugen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Übergänge des CO^+ verwendet, um die Ionenproduktion und Detektion des Spektrometers unter Beweis zu stellen. Ein isotopeninvarianter Fit der neuen und der früheren Daten ergab einen Satz massenunabhängiger Parameter, welcher das Spektrum des CO^+ -Ions bis zu 1 THz mit hoher Genauigkeit beschreibt. Im interstellaren Medium spielt CO^+ eine wichtige Rolle als PDR-Tracer (PDR = Photon Dominated Region) und wurde bereits in mehreren astronomischen Quellen entdeckt.

Die erhaltenen Daten ermöglichen verlässliche Frequenzvorhersagen bis zu 1 THz und stehen in der Kölner Datenbank für Molekülspektroskopie (CDMS) zur Verfügung.