

Kurzzusammenfassung

In dieser Arbeit werden die Ergebnisse von Untersuchungen der Rotationsspektren ausgewählter molekularer Spezies vorgestellt, welche von sowohl astrophysikalischem als auch rein spektroskopischem Interesse sind.

Die Rotationsspektren im Vibrationsgrundzustand und innerhalb der ersten angeregten Knickschwingung ($v_2 = 1$) der deuterierten Blausäure-Isotopomere DCN, D¹³CN, DC¹⁵N und D¹³C¹⁵N wurden im Frequenzbereich bis 2 THz gemessen. *R*-Zweig - Übergänge unterhalb von 1 THz wurden mit sub-Doppler-Auflösung aufgenommen. Mit dieser hochauflösenden Sättigungsspektroskopie konnte die durch den Kernspin des ¹⁴N hervorgerufene Hyperfeinstruktur im Fall von DCN und D¹³CN spektral aufgelöst werden. Für isolierte Spektrallinien kann mit dieser Methode die Übergangsfrequenz auf bis zu 3 kHz bestimmt werden. Zusätzlich wurden mit Doppler-begrenzter Auflösung *R*-Zweig Linien mit hoher Rotations-Quantenzahl *J* im Bereich um 2 THz aufgenommen, sowie einige direkte ℓ -Typ Übergänge mit $\Delta J = 0$ im Frequenzbereich 66 – 118 GHz. Die neugewonnenen Daten wurden zusammen mit zur Verfügung stehenden Infrarot-Daten der Vibrationsbande einer globalen Analyse unterzogen, die hochpräzise Molekülkonstanten für den Vibrationsgrundzustand und den ersten angeregten Knickzustand lieferte. Unter anderem konnten die Kernquadrupol-Wechselwirkungs- und die Kopplungskonstante der magnetischen Kernspin-Rotation-Wechselwirkung des ¹⁴N Kerns bestimmt werden. Zum ersten Mal konnten zwei astrophysikalisch relevante Rotationsübergänge zwischen energetisch niedrig liegenden Niveaus von Methylen (CH₂) mit hoher Genauigkeit im Frequenzbereich um 2 THz gemessen werden. Zur *in situ*-Erzeugung dieses höchst instabilen Radikals wurde eine neue Absorptionszelle entwickelt. Außerdem wurde die Methode der Zeeman-Modulation zum ersten Mal am Kölner Seitenband-Spektrometer angewandt. Zur Analyse der zur Verfügung stehenden Rotationsdaten wurde statt des standardmäßig angewandten Modells eine Euler-Entwicklung des Hamilton-Operators verwendet. Es konnten präzise spektroskopische Parameter ermittelt werden, die eine verbesserte Vorhersage von astrophysikalisch relevanten Labor-Übergangsfrequenzen erlauben. Im Frequenzbereich zwischen 700 – 1000 GHz und um 2 THz wurden mehr als 170 energetisch hochliegende Rotationsübergänge im Grund- und angeregten Knickschwingungszustand der Wasser-Isotopomere HDO und D₂O gemessen. Deutlich verbesserte spektroskopische Parameter konnten für beide Moleküle durch den Euler-Ansatz, angewandt auf einen umfangreichen, globalen Datensatz reiner Rotations-, sowie Rotations-Schwingungsübergänge, gewonnen werden. Die auf diesem Parametersatz basierenden Frequenzvorhersagen liefern wertvolle Informationen sowohl für die Atmosphären- als auch die Astrophysik.