

## Kurzzusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden hochauflösende Rotations-Vibrations-Messungen an den linearen Kohlenstoffketten  $C_7$  und  $C_8$  durchgeführt. Die Spektren wurden mit dem Kölner Kohlenstoffcluster-Experiment aufgenommen, das ein hochauflösendes, durchstimmbares IR-Diodenlaserspektrometer mit einer UV-Laserverdampfungsquelle zur Clustererzeugung kombiniert. Ein wesentlicher Teil dieser Arbeit bestand im Umbau des bestehenden experimentellen Aufbaus mit dem Ziel, das Signal-zu-Rausch-Verhältnis (SNR) deutlich zu verbessern. Die vorgenommenen Änderungen ermöglichten die Untersuchung von Übergängen heißer Banden mit schwachen Absorptionssignalen.

Im Spektralbereich zwischen  $2066,8$  und  $2069,0\text{ cm}^{-1}$  konnten mehr als 70 Rotations-Vibrations-Übergänge beobachtet werden, die im Folgenden der  $\nu_5$  antisymmetrischen Streckschwingung von linearem  $C_8$  zugeordnet wurden. Die Auswertung der Daten ergab einen Bandenursprung nahe  $2067,89\text{ cm}^{-1}$  sowie eine Rotationskonstante des Vibrationsgrundzustands von ungefähr  $0,0208\text{ cm}^{-1}$ . Die Analyse der gemessenen Triplett-Aufspaltung gibt Grund zu der Annahme, dass es unter dem Einfluss der Rotation zum Umkoppeln des Elektronenspins kommt, was einem Übergang zwischen den beiden idealisierten Kopplungsmodellen Hund'scher Fall (a) und (b) entspricht.

Für lineares  $C_7$  konnten hochauflösende Infrarotmessungen der  $\nu_4$  antisymmetrischen Streckschwingung sowie zugehöriger heißer Banden im Frequenzbereich zwischen  $2135,0$  und  $2141,0\text{ cm}^{-1}$  aufgenommen werden. Die Spektren der  $\nu_4$  Fundamentalen sowie der  $\nu_4 + \nu_{11} - \nu_{11}$ ,  $\nu_4 + \nu_8 - \nu_8$  und  $\nu_4 + 2\nu_{11} - 2\nu_{11}$ ,  $\ell=2$  Banden wurden analysiert und mit den bisherigen Messungen [1,2] und den *ab initio* Berechnungen [3] verglichen. Für die zwei energetisch tiefliegenden Knickschwingungen,  $\nu_8$  und  $\nu_{11}$ , wurden in der vorliegenden Untersuchung Rotationskonstanten bestimmt, die um nur  $0,2\%$  von  $B_0 = 0,0306259(29)\text{ cm}^{-1}$ , dem Wert für den Grundzustand, abweichen. Diese Werte stimmen sehr gut mit den neuesten Vorhersagen überein. Aus der Analyse der heißen Banden konnten die  $\ell$ -Typ Verdopplungskonstanten  $q$  gewonnen und mit deren Hilfe die Bandenursprünge der fundamentalen Biegeschwingungen abgeleitet werden. Mit  $\nu_{11} = 54(11)\text{ cm}^{-1}$  und  $\nu_8 = 81(23)\text{ cm}^{-1}$  liegen nun erstmals experimentelle Abschätzungen für diese Werte vor. Die im Rahmen dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse bestätigen eindeutig die *ab initio* Rechnungen, nach denen es sich bei linearem  $C_7$  um ein eher steifes Kettenmolekül mit Biegeschwingungen von kleiner Amplitude handelt. Damit zeigt  $C_7$  das gleiche Verhalten wie die verwandten Kettenmoleküle  $C_4$ ,  $C_5$  und  $C_9$ .

[1] J.R. Heath, R.A. Sheeks, A.L. Cooksy, R.J. Saykally. *Science* 249, 895–897, 1990

[2] J.R. Heath, R.J. Saykally. *J. Chem. Phys.* 94 (3), 1724–1729, 1991

[3] P. Botschwina. *Chem. Phys. Lett.* 354, 148–155, 2002