

## Sven Thorwirth: Carbon chain- and ring-molecules in the laboratory and in space. 2001

Im Rahmen der hier vorgestellten Arbeit wurden sowohl rotationsspektroskopische Untersuchungen ausgewählter, astrophysikalisch relevanter Moleküle im Labor als auch radioastronomische Beobachtungen linearer Kohlenstoffketten durchgeführt.

Im Rahmen der Laborspektroskopischen Messungen wurden die Millimeter- und Submillimeter-Spektren des Cyanoacetylen,  $\text{HC}_3\text{N}$ , und seiner einfach substituierten Isotopomere  $\text{HCC}^{13}\text{CN}$ ,  $\text{HC}^{13}\text{CCN}$ ,  $\text{H}^{13}\text{CCCN}$  und  $\text{HCCC}^{15}\text{N}$  im Vibrationsgrundzustand und diversen astrophysikalisch relevanten Vibrationszuständen untersucht. Des Weiteren konnten die doppelt substituierten Isotopomere  $\text{HC}^{13}\text{C}^{13}\text{CN}$ ,  $\text{H}^{13}\text{CC}^{13}\text{CN}$ ,  $\text{H}^{13}\text{C}^{13}\text{CCN}$  und  $\text{HCC}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$  im Labor erstmals rotationsspektroskopisch charakterisiert werden.

Um die Vorhersage der Übergangsfrequenzen von direkten  $l$ -Typ Übergängen des Hydrogenisocyanids, HNC, im Vibrationszustand  $\nu_2=1$  für eine astronomische Suche zu ermöglichen, wurden die entsprechenden  $\Delta J=1$  Vibrationsatelliten bis 2THz vermessen. Begleitend wurde ebenfalls der Vibrationsgrundzustand von HNC im Labor untersucht. Für Hydrogencyanid, HCN, wurde eine Reihe von direkten  $l$ -Typ Übergängen im 2mm- und 4mm-Bereich im Labor gemessen.

Des Weiteren wurde das reine Rotationsspektrum des Ring-Moleküls Ethylenimin ( $c\text{-C}_2\text{H}_4\text{NH}$ ) in ausgewählten Frequenzbereichen von 9GHz bis 1.88THz beobachtet und analysiert. Durch Messungen des Stark-Effekts auf geeignete Hyperfeinstrukturübergänge konnten die von Null verschiedenen Dipolmomentkomponenten  $\mu_b=0.97(12)\text{D}$  und  $\mu_c=1.357(25)\text{D}$  verlässlich bestimmt werden, so dass auf Basis des nun vorhandenen Datensatzes exakte Vorhersagen für eine astronomische Suche möglich sind.

Im Zuge der astronomischen Beobachtungen von HCN im protoplanetaren Nebel CRL618, in Richtung der galaktischen Zentrums-Quelle SgrB2(N) sowie den Quellen Orion-KL und G10.47+0.03 gelang erstmalig die Detektion von direkten  $l$ -Typ Übergängen eines linearen Moleküls im Weltraum. Beobachtungen von  $\text{HC}_3\text{N}$  in CRL618 und Analyse der Vibrationsatelliten-Muster verschiedener Rotationsübergänge lieferten Informationen bezüglich des Temperaturprofils der zirkumstellaren Hülle. Mit der Detektion von Vibrationsatelliten von  $\text{HC}_5\text{N}$  in CRL618 gelang desweiteren der erstmalige Nachweis von vibrationsangeregtem  $\text{HC}_5\text{N}$  im Weltraum.

---

In this thesis, the results of rotational laboratory spectroscopic studies of selected astrophysically important molecules as well as of astronomical observations of the linear carbon chain molecules HCN,  $\text{HC}_3\text{N}$  and  $\text{HC}_5\text{N}$  are presented.

In the course of the laboratory spectroscopic investigations, millimeter- and submillimeter-wave spectra of  $\text{HC}_3\text{N}$  and its monosubstituted isotopomers  $\text{HCC}^{13}\text{CN}$ ,  $\text{HC}^{13}\text{CCN}$ ,  $\text{H}^{13}\text{CCCN}$ , and  $\text{HCCC}^{15}\text{N}$  in the ground vibrational and selected astrophysically relevant vibrationally excited states were investigated. Furthermore, the doubly substituted isotopomers  $\text{HC}^{13}\text{C}^{13}\text{CN}$ ,  $\text{H}^{13}\text{CC}^{13}\text{CN}$ ,  $\text{H}^{13}\text{C}^{13}\text{CCN}$ , and  $\text{HCC}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$  could be characterized for the first time by means of rotational spectroscopy.

To obtain reliable predictions for astronomical searches for direct  $l$ -type transitions of hydrogenisocyanide, HNC, in its  $\nu_2=1$  vibrational state, the corresponding  $\Delta J=1$  vibrational satellites were investigated up to 2THz. In addition, appropriate transitions belonging to the ground vibrational state were investigated. In the case of hydrogencyanide, HCN, the direct  $l$ -type transitions of the  $\nu_2=1$  state were measured in the 2mm and 4mm regime.

Finally, the pure rotational spectrum of ethylenimine ( $c\text{-C}_2\text{H}_4\text{NH}$ ) was investigated in selected frequency regions from 9GHz to 1.88THz. Stark-measurements of appropriate hyperfine transitions permitted the determination of reliable values for the two non-zero dipole moment components  $\mu_b=0.97(12)\text{D}$  and  $\mu_c=1.357(25)\text{D}$ . The new data set allows for accurate predictions of transition

frequencies and line intensities required for an astronomical search for this molecule.

Radio astronomical observations of HCN toward the protoplanetary nebula CRL618, the galactic center source SgrB2(N), and the regions Orion-KL and G10.47+0.03 yielded the first detection of direct  $l$ -type transitions of a linear molecule in space. Observations of HC<sub>3</sub>N in CRL618 and subsequent analysis of the vibrational satellite patterns of several rotational transitions provided valuable information concerning the temperature structure of the circumstellar envelope. The detection of vibrational satellites belonging to HC<sub>5</sub>N in CRL618 marks the first detection of vibrationally excited HC<sub>5</sub>N in space.