

Ute Berndt: Infrarot-Spektroskopie an kleinen Kohlenstoff-Clustern. 2000

Während der hier dargestellten Arbeit wurde ein Experiment aufgebaut, mit dem hochaufgelöste Absorptionsspektren im infraroten Spektralbereich von Clustern in der Gasphase aufgenommen werden können. Die Cluster werden durch Laserverdampfung erzeugt und in einem kalten Überschall-Molekularstrahl auf wenige Kelvin abgekühlt. Mit dem in der Arbeit beschriebenen Aufbau konnten zum ersten Mal Gasphasen-Spektren von linearem C_{10} und linearem C_8 gemessen werden.

Mehr als 100 beobachtete Übergänge konnten einer antisymmetrischen Streckschwingung von linearem C_{10} in einem $^3\Sigma_g^-$ -Grundzustand zugeordnet werden. Der Bandenursprung liegt bei $2074.4109(2)\text{cm}^{-1}$ und die Rotationskonstante des Grundzustandes wurde zu $B_0''=0.010475(7)\text{cm}^{-1}$ bestimmt. Im Spektrum ist die Triplett-Aufspaltung klar zu erkennen, die eine Spin-Spin-Wechselwirkungskonstante $\lambda''=-1.79(3)\text{cm}^{-1}$ bewirkt. Der elektronische Grundzustand ist ein invertierter $^3\Sigma$ -Zustand nach dem Hund'schen Fall (a).

Etwa 43 Übergänge zwischen 2066cm^{-1} und 2070cm^{-1} konnten einer antisymmetrischen Streckschwingung von linearem C_8 zugeordnet werden.

A new experimental setup using high resolution infrared diode laser absorption spectroscopy of a supersonic carbon cluster beam is described in the present work. The clusters are produced by laser ablation of a graphite rod.

For the first time, rotationally resolved gas phase spectra of linear C_{10} and linear C_8 carbon clusters have been observed. More than 100 transitions have been assigned to the $^3\Sigma_g^-$ -ground state of an asymmetric stretching mode of linear C_{10} . The band origin is centered at $2074.4109(2)\text{cm}^{-1}$ and the ground state rotational constant was found to be $B_0''=0.010475(7)\text{cm}^{-1}$. The triplet structure has been clearly resolved in the spectra, and resulted in a large spin-spin coupling constant $\lambda''=-1.79(3)\text{cm}^{-1}$. The ground electronic state is found to be an inverted $^3\Sigma$ with Hund's coupling case (a). About 43 transitions between 2066cm^{-1} and 2070cm^{-1} were tentatively assigned to the ν_5 antisymmetric stretching vibration of linear C_8 .