

Ulrike Fuchs: High resolution spectroscopy of Ethyl Methyl Ether and hydrogen cyanide isotopomers

In dieser Arbeit wurden erstmals, mittels hochauflösender Rotationspektroskopie, Messungen von Rotations-Torsions-übergängen an Ethyl Methyl Ether im Vibrationsgrundzustand bis zu einer Frequenz von 350 GHz durchgeführt. Bisher veröffentlichte Labordaten von Ethyl Methyl Ether umfassen lediglich Rotationsübergänge bis 35 GHz. Eine Zuordnung von über 1000 neuen und ca.~100 schon bekannten Übergängen erlaubt die zuverlässige Vorhersage von Frequenzen bis zu 400 GHz, basierend auf einem neu bestimmten Parametersatz. In den Übergängen ist die Aufspaltung jedes Übergangs in bis zu fünf Linien, aufgrund der internen Rotation der zwei Methyl Gruppen des Ethyl Methyl Ethers, spektroskopisch nachgewiesen worden. Die Entdeckung von Ethyl Methyl Ether im Interstellaren Medium (ISM) sollte nun, mit Hilfe des neu erhaltenen Datensatzes, möglich sein. Die Suche wurde im Rahmen dieser Arbeit begonnen und erbrachte die wahrscheinliche Detektion dieses Moleküls im massereichen Sternentstehungsgebiet G34.26.

Für verschiedene Blausäure-Isotope, die ebenfalls von großer astrophysikalischer Relevanz sind, wie $\text{H}^{13}\text{C}^{14}\text{N}$, $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$, und $\text{H}^{12}\text{C}^{15}\text{N}$, konnte ein genauere Datensatz im Grund- und ersten angeregten Knickschwingungszustand ($v_2 = 1$) berechnet werden. Hierzu wurden zwei verschiedene Spektroskopiemethoden verwendet, die ‘höchstauflösende’ Sub-Doppler Spektroskopie und die Doppler-limitierte Rotationspektroskopie. Mit Hilfe der Sub-Doppler Spektroskopie konnten jeweils die elf niedrigsten Rotationsübergänge im Grund- und ersten angeregten Knickschwingungszustand gemessen werden. Diese Messungen umfassen den Frequenzbereich von 86 GHz bis 960 GHz. Außerdem konnte für H^{13}CN die Hyperfeinstruktur bezüglich des Kernspins von ^{14}N erstmalig bei Frequenzen über 170 GHz aufgelöst werden. Starke Übergänge weisen eine Genauigkeit von bis zu 3 kHz auf. Mit Hilfe der Doppler-Spektroskopie wurden im Frequenzbereich zwischen 1.8 und 2 THz für jedes Isotopomer vier Übergänge bis zum Rotationsübergang $J = 24 - 23$ im Grund- und ersten angeregten Knick-Schwingungszustand gemessen. Die Genauigkeit dieser Messungen lag bei 30 kHz. Die neu gewonnenen Daten wurden mit schon bekannten Messungen kombiniert und liefern einen neuen, sehr genauen Datensatz für die drei untersuchten Isotope von HCN im Grund- und ersten angeregten Vibrationszustand.

Der neu gewonnene Datensatz von Ethyl Methyl Ether und den Blausäure Isotopen $\text{H}^{13}\text{C}^{14}\text{N}$, $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$, und $\text{H}^{12}\text{C}^{15}\text{N}$ wird in der ‘Cologne Database for Molecular Spectroscopy’ (CDMS) zur Verfügung gestellt.

In this work, high-resolution measurements of rotational-torsional transitions of ethyl methyl ether were performed in its vibrational-torsional ground state at frequencies up to 350 GHz. Up to now, the only published laboratory rotational-torsional transitions for ethyl methyl ether lie at frequencies below 35 GHz. The new results correspond to about 1000 new observed transitions including internal rotation splitting of each transition due to torsion of the two methyl groups. A simultaneous fit to experimental accuracy of these and ~100 previously assigned transitions allows reliable prediction of additional transition frequencies reaching 400 GHz, based on a newly calculated parameter set. Hence, the presented data set should enable the astrophysical detection of ethyl methyl ether in the Interstellar Medium (ISM). Ethyl methyl ether could be tentatively detected in hot cores which are quiescent high-density sources associated with regions of high-mass star formation.

Furthermore, a highly precise set of molecular constants for the ground and first excited vibrational state of the hydrogen cyanide isotopes ($\text{H}^{13}\text{C}^{14}\text{N}$, $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$, and $\text{H}^{12}\text{C}^{15}\text{N}$) has been obtained. The corresponding spectra were recorded with two different methods, Sub-Doppler spectroscopy with highest resolution and Doppler-limited spectroscopy. Within Sub-Doppler resolution, the eleven lowest rotational transitions of $\text{H}^{13}\text{C}^{14}\text{N}$, $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$, and $\text{H}^{12}\text{C}^{15}\text{N}$ have been measured in the ground and first excited vibrational state ($v_2 = 1$). Hyperfine structure according to the nuclear spin of ^{14}N could be resolved for several transitions. These measurements cover a frequency range of 86 -

960 GHz. Accuracies achieved for the Sub-Doppler spectra are about 3 kHz for isolated strong lines. With Doppler-limited spectroscopy four transitions of each isotopomer have been recorded in the THz region between 1.8 and 2 THz in the ground and first excited vibrational state, up to rotational transition $J = 24 - 23$. The precision of these measurements is about 30 kHz. These newly measured data have been combined with previous rovibrational data, so that a new, precise data set was achieved for the ground and first excited vibrational state.

The recorded laboratory data of ethyl methyl ether and HCN isotopomers will be accepted into the "Cologne Database for Molecular Spectroscopy", CDMS.