# Anhang H

# Programme

Im folgenden sollen die im Rahmen der vorliegenden Dissertation neu geschriebenen Programme zusammengestellt und kurz erläutert werden. Sämtliche Quelltexte finden sich zusammen mit den Quelltexten aller innerhalb der vorliegenden Dissertation modifizierten Programme auf der beigefügten *Compact Disc* unter Programs.

## H.1 quad32

Das interaktive, in der Sprache C geschriebene Programm quad32 wurde entworfen, um auf einfachem Wege aus den experimentellen Frequenzen der einzelnen Komponenten eines durch Kernquadrupol-Wechselwirkung aufgespaltenen $a$-Typ-Rotationsübergangs eines linearen, eines prolaten oder eines fast prolaten Moleküls die zugehörigen Kopplungskonstanten bestimmen zu können. Hierzu fragt das Programm zunächst die untere Rotationsquantenzahl $J''$, den Betrag der Quantenzahl $k$ und bei $|k| = 1$ zusätzlich die Parität für den betreffenden Übergang ab. Danach sind gemäß Gleichung (3.127) Startwerte für die Kopplungskonstante $eQq$, bei $|k| = 1$ auch für die zusammengezogene Konstante $eQq\eta$ sowie für die Mittelfrequenz vorzugeben. Eine nachgestellte 0 gibt hierbei an, daß die Konstante später festgehalten werden soll, eine nachgestellte 1 hingegen, daß die Konstante später angepaßt werden soll. Auf der Grundlage der Startwerte werden dann die Frequenzen aller Komponenten mit $\Delta F = +1$ berechnet, und anschließend sind die entsprechenden experimentellen Werte einzugeben, wobei immer die Unsicherheit der einzelnen Werte nachgestellt werden muß. Ausgegeben werden dann die angepaßten Konstanten mit ihrem Vertrauensbereich sowie die Standardabweichung.

Zusätzlich kann mit dem Programm quad32 auch die kernmagnetische Wechselwirkung erfaßt werden, beschränkt ist es derzeit jedoch auf Moleküle mit einem wechselwirkenden Kern der Kernspinquantenzahl $\frac{3}{2}$. Zu beachten ist ferner, daß die experimentellen Frequenzen der einzelnen Komponenten und ihre Unsicherheiten auf der jetzigen Ausbaustufe des Programms grundsätzlich mit vier Nachkommastellen angegeben werden müssen.

## H.2 est32

Das ebenfalls in der Sprache C geschriebene Programm est32 wurde speziell bei der Analyse des $a$-Typ-Rotationsspektrums von Chlorfulminat ClCNO eingesetzt, um bei bekannter Kopplungskonstante $eQq$ die Mittelfrequenzen aller durch Kernquadrupol-Wechselwirkung erkennbar aufgespaltenen $a$-Typ-Rotationsübergänge einer Serie zu bestimmen. Die Eingabedateien für est32 mit der Endung .tab sind hierbei so aufgebaut, daß in der zweiten Zeile die Kopplungskonstante $eQq$ in MHz und der Betrag der Quantenzahl $k$ angegeben sind. Ab der fünften Zeile steht in allen ungeradzahligen Zeilen zuerst die untere Rotationsquantenzahl $J''$ mit einer nachgestellten 0 oder 1, die angibt, ob für den betreffenden Übergang eine Mittelfrequenz bestimmt werden soll. Es folgen die experimentellen Frequenzen der vier Komponenten mit $\Delta F = +1$, und die nachgestellte Ziffer gibt jetzt jeweils an, ob die betreffende Komponente beim Bestimmen der Mittelfrequenz berücksichtigt werden soll. Die Ausgabe aller von est32 bestimmten Mittelfrequenzen erfolgt dann in der Weise, daß diese in die Eingabedateien hinter die experimentellen Frequenzen der Komponenten geschrieben werden. Zusätzlich werden in die geradzahligen Zeilen die berechneten Frequenzen der Komponenten geschrieben.

Gleichzeitig werden von est32 immer auch Reihenentwicklungskonstanten nach Gleichung (1.11) angepaßt und so Prognosen für die Mittelfrequenzen höherer und tieferer $a$-Typ-Rotationsübergänge berechnet, die ebenfalls in die geradzahligen Zeilen der Eingabedatei geschrieben werden. Die Startwerte für die Reihentwicklungskonstanten stehen wie die Kopplungskonstante $eQq$ und der Betrag der Quantenzahl $k$ in der zweiten Zeile der Eingabedatei. Diese werden dann mit den neu angepaßten Reihenentwicklungskonstanten überschrieben.

## H.3 pat

Das Programm pat, ein weiteres in der Sprache C geschriebenes Programm, wurde ausschließlich für die Suche nach der Fundamentalbande der quasilinearen Knickschwingung $\nu_5$ von Bromfulminat BrCNO konzipiert. Da die Funktionsweise dieses Programms bereits in Abschnitt 8.2.1 beschrieben wurde, soll hierauf an dieser Stelle auch nicht mehr näher eingegangen werden.

## H.4 qlinc97

In dem für die simultane Analyse von bis zu fünf Vibrationszuständen ausgelegten Programm qlinc97x5 wurden wiederum in der Sprache C die in Abschnitt 6.5.2 vorgestellten, neu formulierten Matrixelemente umgesetzt, in denen anders als bei den Matrixelementen eines linearen Moleküls eine beliebige Abhängigkeit der spektroskopischen Konstanten in den einzelnen Subzuständen eines gegebenen Vibrationszustands vom Betrag der Quantenzahl $k$ zugelassen wird. Ursprüngliches Ziel war es, die effektiven Konstanten dieses Hamilton-Operators an die experimentell beobachteten $a$-Typ-Rotationsübergänge der Halogenfulminate BrCNO und ClCNO anzupassen. Bei ersten Testläufen zeigte sich jedoch sehr schnell, daß eine auch nur annähernd adäquate Beschreibung der $a$-Typ-Rotationsübergänge dieser hochgradig quasilinearen Moleküle mit dem verwendeten Ansatz prinzipiell nicht möglich war. Eingesetzt werden könnte dieses Programm jedoch als Alternative zu den Programmen der linc-Familie, zu den Matrixelementen eines linearen Moleküls etwa bei der Beschreibung der $a$-Typ-Rotationsübergänge von weniger ausgeprägt quasilinearen Molekülen wie der Knallsäure HCNO.

Die Eingabedateien für qlinc97x5 tragen die Endung .qin, die Ausgabedateien entsprechend die Endung .qot. Einige Beispiele können auf der beigefügten *Compact Disc* unter BrCNO.i01 dem Verzeichnis qLinc entnommen werden. Insbesondere die Eingabedateien entsprechen im wesentlichen den Eingabedateien für die Programme der linc-Familie; hinzuweisen ist lediglich darauf, daß die Eingabe und die Ausgabe effektiver Konstanten für einen gegebenen Vibrationszustand grundsätzlich in der Reihenfolge $G_{v,|k|}$, $B_{v,|k|}$, $D_{v,|k|}$, $\ldots$ , $q_{v,|k|}$, $q^J_{v,|k|}$, $\ldots$ erfolgt, wobei immer an erster Stelle die effektive Konstante für die betraglich größte Quantenzahl $k$ steht.

# Anhang I

# Veröffentlichungen

Bislang ist erst ein kleiner Teil der vorliegenden Dissertation veröffentlicht worden. Weitere Veröffentlichungen werden jedoch innerhalb der nächsten Monate folgen.

## I.1 Fachzeitschriften

1. C. W. Gillies, J. Z. Gillies, H. Lichau, B. P. Winnewisser, and M. Winnewisser, **Gas Phase Detection of the Unstable Halofulminate BrCNO by Millimeter Wave Spectroscopy**, *Chem. Phys. Lett.* **285**, 391–397 (1998).

## I.2 Tagungsbeiträge

1. H. Lichau, C. W. Gillies, J. Z. Gillies, B. P. Winnewisser, and M. Winnewisser, **The Rotational Spectrum of BrCNO, an Extremely Quasilinear Molecule**, *15$^{th}$ Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*, Glasgow, Schottland, 7.–11. September 1997. Poster M25.
2. H. Lichau, B. P. Winnewisser, M. Winnewisser, C. W. Gillies, and J. Z. Gillies, **The Quasilinear Nature of some Simple Covalent Fulminates XCNO, as revealed by Rotational Spectroscopy in the MMW Range**, *53$^{rd}$ International Symposium on Molecular Spectroscopy*, Columbus, Ohio, 15.–19. Juni 1998. Vortrag TH09.
3. S. C. Ross, H. Lichau, B. P. Winnewisser, and M. Winnewisser, **The Low-Lying XCN Bending Modes of the Quasilinear Molecules ClCNO and BrCNO**, *54$^{th}$ International Symposium on Molecular Spectroscopy*, Columbus, Ohio, 14.–18. Juni 1999. Vortrag in Vorbereitung.
4. H. Lichau, M. Lock, M. Winnewisser, and S. C. Ross, **The Low-Lying CCN Bending Mode of the Close-To-Linear Molecule NCCNO**, *54$^{th}$ International Symposium on Molecular Spectroscopy*, Columbus, Ohio, 14.–18. Juni 1999. Vortrag in Vorbereitung.