

Anhang F

EXPERIMENTELLE DATEN ZU KAPITEL 7

Alle experimentellen Daten zu Kapitel 7, den spektroskopischen Untersuchungen an OC₅O zwischen 2 000 und 2 500 cm⁻¹, sind auf der beigefügten *Compact Disc* unter C5O2.a.zip abgespeichert. Dieses File wurde ebenfalls mit dem Programm WinZIP 5.6 für Windows/NT erstellt. Die verschiedenen Dateien sind in den Verzeichnissen FTIR/Zelle/C5O2/ BG (Hintergrundspektren), Meas (Meßblöcke), Calib (Kalibration), Doc (Datendokumentation), Peakl (Peaklisten) und TFILE (Transmissionsfiles) abgespeichert. Die aufgenommenen FTIR-Spektren im OPUS-Format befinden sich in dem Verzeichnis FTIR/Zelle/C5O2/TFILE bzw. FTIR/Jet/C5O2/TFILE. Die Transmissionspektren der Messungen, die mit der 3 m-Zelle durchgeführt wurden, tragen die Bezeichnung ZTC5O2D1.1 bzw. ZTC5O2D2.1, das der Messung an dem OC₅O-Molekularstrahl die Bezeichnung ZTJETWZ1.1. Zusätzlich befindet sich in dem Verzeichnis FTIR/Zelle/C5O2 ein Transmissionsfile mit der Bezeichnung ZTC5O2D1D2.1, das durch Verwendung des Spektrums ZTC5O2D2.1 als Background erhalten wurde. In der Tabelle F.1 sind die Dateien der einzelnen Meßserien an OC₅O aufgeführt. In der Tabelle F.2 sind die Transmissionsfiles und Angaben über die Kalibration zusammengestellt.

Im Verzeichnis Dissertation/C5O2 befinden sich die für jeden Zustand erstellten Eingabefiles zur Bestimmung der spektroskopischen Konstanten. Diese wurden mit dem Programm linc96 berechnet. Es handelt sich um die Files v4v5jetrt.lin und v4v5rt.lin. Die dazugehörigen Ausgabefiles tragen die Endung lot.

Sämtliche experimentellen Übergangswellenzahlen $\tilde{\nu}_{\text{obs}}$ sind in den nun folgenden Tabellen zusammengestellt, wobei immer auch deren Abweichungen von den berechneten Übergangswellenzahlen ($\tilde{\nu}_{\text{obs}} - \tilde{\nu}_{\text{calc}}$) angegeben sind, wie sie sich aus den mit linc96 bestimmten spektroskopischen Konstanten der Tabelle 7.5 ergeben. Ein (J) kennzeichnet eine Linienposition, die dem Spektrum des OC₅O-Molekularstrahls entnommen wurde. Ein Asterix hinter einer Abweichung deutet an, daß der betreffende Übergang bei der Anpassung der Konstanten nicht berücksichtigt wurde.

Tabelle F.1 Die verschiedenen Meßblöcke der FTIR-Messungen an OC₅O.

Substanz	Meßbereich /cm ⁻¹	Scans pro Block	Zahl der Blöcke	Auflösung /cm ⁻¹	<i>P</i> /mbar	Dateiname	Messung
C5O2+Ar	1 859 – 2 759	4	6	0.008	110	JETW1.2-7	Jet
C5O2+Ar	1 859 – 2 759	4	1	0.008	150	JETZ1.5	Jet
C5O2+Ar	1 859 – 2 759	4	1	0.008	150	JETZ1.10	Jet
C5O2+Ar	1 859 – 2 759	8	2	0.008	150	JETZ1.11-12	Jet
C5O2+Ar	1 859 – 2 759	4	3	0.008	150	JETZ1.13-15	Jet
C5O2	1 859 – 2 759	10	10	0.002 1	0.18	C5O2D1.1-10	Zelle
C5O2	1 859 – 2 759	10	10	0.002 1	0.18	C5O2D1.11-20	Zelle

Tabelle F.2 Zusammenstellung der verschiedenen Transmissionsfiles von OC₅O.

Messung	Meßbereich /cm ⁻¹	Scans	Single-Beam- Spektren	Transmissions- file	Kalib.	Kalib.- messung	BG- File
C5O2- Jet	1 950 – 2 750	60	JETW1.2-7 JETZ1.5 JETZ1.10-15	ZTJETWZ1.1	CO (extern)	ZTJETV11.1	JETWB.1
C5O2- Zelle	1 950 – 2 750	100	C5O2D1.1-10	ZTC5O2D1.1	CO (extern)	ZTC5O2E1.1	C5O2AB.1
C5O2- Zelle	1 950 – 2 750	100	C5O2D1.1-20	ZTC5O2D2.1	CO (extern)	ZTC5O2E1.1	C5O2AB.1

Tabelle F.3 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_4) - (GS)$, entnommen dem Spektrum des OC₅O-Molekularstrahls .

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0			2242.180 863	-0.001 169
2	2242.022 004	-0.000 476	2242.288 237	0.000 172
4	2241.915 544	-0.000 233	2242.395 002	0.000 960
6	2241.809 166	0.000 147	2242.501 047	0.000 770
8	2241.702 900	0.000 379	2242.608 006	0.000 890
10	2241.596 911	0.000 282	2242.715 242	0.000 401
12	2241.491 281	-0.000 344	2242.822 893	-0.000 675
14	2241.386 289	-0.001 336	2242.932 095	-0.001 071
16	2241.282 820	-0.001 681	2243.044 509	0.001 286
18	2241.183 948	0.002 108	2243.153 379	0.000 289
20	2241.093 025*	0.014 030	2243.261 750	-0.000 296
22			2243.368 903	-0.000 708
24			2243.476 388	0.000 306
26			2243.583 319	0.000 000
28			2243.691 275*	-0.004 579
30			2243.799 424*	-0.022 957
32			2243.854 122*	-0.123 578
34			2243.909 014*	-0.276 167
36			2244.018 105*	-0.461 738

Tabelle F.4 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_4) - (GS)$, entnommen dem Spektrum das mit OC₅O in der 3 m Zelle erhalten wurde.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0			2242.180 863(J)	-0.002 858
2	2242.022 004(J)	-0.002 413	2242.288 237(J)	-0.001 646
4	2241.915 544(J)	-0.002 630	2242.395 002(J)	-0.001 005
6	2241.809 166(J)	-0.002 730	2242.501 047(J)	-0.001 039
8	2241.702 900(J)	-0.002 677	2242.608 006(J)	-0.000 104
10	2241.596 911(J)	-0.002 298	2242.715 242(J)	0.001 176
12	2241.491 281(J)	-0.001 498	2242.822 893(J)	0.002 955
14	2241.386 289(J)	0.000 014	2242.932 095(J)	0.006 387
16	2241.282 820(J)	0.003 142	2243.044 509*(J)	0.013 154
18	2241.183 948*(J)	0.010 978	2243.153 379*(J)	0.016 523
20			2243.261 750*(J)	0.019 564
22			2243.368 903*(J)	0.021 586
24			2243.476 388*(J)	0.024 169
26			2243.583 319*(J)	0.026 456
28			2243.691 275*(J)	0.030 061
30			2243.799 424*(J)	0.034 185
32			2243.854 122*(J)	-0.014 781
34			2243.909 014*(J)	-0.063 157
36			2244.018 105*(J)	-0.056 902
38				
40	2239.960 960*	-0.023 313	2244.277 140	-0.002 093
42	2239.859 485*	-0.014 548	2244.381 800	0.001 250
44	2239.755 212*	-0.008 070	2244.481 918	0.000 629
46	2239.649 639*	-0.002 346	2244.583 338	0.001 923
48	2239.541 267*	0.001 159	2244.683 262	0.002 369

Fortsetzung Tabelle F.4

50	2239.428 908*	0.001 289	2244.781 746	0.002 056
52	2239.317 324*	0.002 838	2244.879 288	0.001 513
54	2239.204 411	0.003 732	2244.976 138	0.001 020
56	2239.090 529	0.004 358	2245.071 714	0.000 021
58	2238.975 317	0.004 382	2245.166 570	-0.000 903
60	2238.859 302	0.004 354	2245.260 429	-0.002 007
62	2238.742 290	0.004 101	2245.353 679	-0.002 884
64	2238.624 308	0.003 670	2245.446 042	-0.003 794
66	2238.505 468	0.003 186	2245.537 048	-0.005 193
68	2238.385 964	0.002 858	2245.628 276	-0.005 493
70	2238.265 877	0.002 774	2245.718 230	-0.006 181
72	2245.807 796	-0.006 368		
74	2238.022 492	0.001 898	2245.896 365	-0.006 663
76	2237.899 720	0.001 632	2245.984 187	-0.006 819
78	2237.776 615	0.001 862	2246.071 593	-0.006 513
80	2237.652 513	0.001 916	2246.158 112	-0.006 227
82	2237.527 663	0.002 030	2246.245 214	-0.004 505
84	2237.402 453	0.002 577	2246.245 214*	-0.089 049
86	2237.276 662	0.003 315	2246.410 664	-0.007 329
88	2237.150 898	0.004 831	2246.497 018	-0.003 915
90			2246.577 528	-0.005 581
92	2236.890 785	0.001 424	2246.660 281	-0.004 271
94	2236.764 966	0.004 972	2246.742 037	-0.003 255
96	2236.632 417	0.002 422	2246.822 575	-0.002 787
98	2236.502 610	0.003 214	2246.903 417	-0.001 380
100	2236.371 778	0.003 542	2246.983 456	-0.000 175
102	2236.239 533	0.002 985	2247.062 609	0.000 711
104	2236.108 120	0.003 750	2247.141 401	0.001 769
106	2235.975 017	0.003 282	2247.218 643	0.001 778
108	2235.841 914	0.003 235	2247.296 051	0.002 425
110	2235.708 119	0.002 889	2247.372 684	0.002 744
112	2235.572 828	0.001 412	2247.449 316	0.003 488
114	2235.437 814	0.000 554	2247.524 204	0.002 900
116	2235.301 775	-0.001 001		
118	2235.165 515	-0.002 459	2247.672 650	0.001 609
120	2235.028 535	-0.004 319	2247.746 984	0.001 694
122	2234.889 339	-0.008 066	2247.820 847	0.001 751
124	2234.752 192	-0.009 414	2247.894 876	0.002 452
126			2247.966 662	0.001 442
128			2248.045 316	0.007 904
130			2248.101 980	-0.006 931
132			2248.175 040	-0.004 563
134			2248.246 272	-0.003 079
136			2248.312 685	-0.005 304
138			2248.395 050	0.009 728
140			2248.452 324	0.001 201
142			2248.514 998	-0.000 129

Tabelle F.5 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge (ν_5) – (GS) von OC_5O , entnommen dem Spektrum das mit OC_5O in der 3 m Zelle erhalten wurde.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
2				
4				
6			2065.929 661	0.000 834
8	2065.131 299	0.000 229	2066.033 233	0.000 054
10	2065.022 734	0.000 043	2066.137 416	0.000 358
12	2064.913 580	-0.000 261	2066.240 192	-0.000 271
14	2064.803 970	-0.000 551	2066.343 606	0.000 210
16	2064.694 006	-0.000 725	2066.445 926	0.000 070
18	2064.584 451	-0.000 023	2066.548 488	0.000 642
20	2064.473 920	0.000 169	2066.649 596	0.000 230
22	2064.362 772	0.000 209	2066.750 317	-0.000 099
24	2064.251 015	0.000 103	2066.850 940	-0.000 059
26	2064.139 058	0.000 259	2066.951 017	-0.000 098
28	2064.025 584	-0.000 642	2067.050 761	-0.000 004
30	2063.913 155	-0.000 041	2067.150 228	0.000 276
32	2063.799 473	-0.000 236	2067.248 525	-0.000 150
34	2063.685 757	-0.000 012	2067.346 136	-0.000 801
36	2063.571 293	-0.000 082	2067.444 461	-0.000 278
38	2063.456 566	0.000 034	2067.541 740	-0.000 342
40	2063.341 548	0.000 309	2067.638 563	-0.000 404
42	2063.225 816	0.000 316	2067.735 267	-0.000 129
44	2063.109 414	0.000 099	2067.830 525	-0.000 844
46	2062.992 879	0.000 192	2067.927 084	0.000 197
48	2062.875 493	-0.000 123	2068.022 085	0.000 134
50	2062.758 108	0.000 003	2068.117 308	0.000 746
52	2062.640 175	0.000 022	2068.210 641	-0.000 079
54	2062.521 688	-0.000 074		
56	2062.403 208	0.000 275	2068.397 556	-0.000 120
58	2062.283 509	-0.000 157	2068.490 196	-0.000 278
60	2062.164 005	0.000 044	2068.583 224	0.000 407
62	2062.041 987*	-0.001 830	2068.675 047	0.000 342
64				
66	2061.799 772*	-0.002 439	2068.857 060	-0.000 045
68	2061.677 498*	-0.003 249	2068.948 177	0.000 564
70	2061.555 487*	-0.003 351	2069.038 255	0.000 599
72	2061.432 631*	-0.003 853	2069.128 306	0.001 076
74	2061.310 551*	-0.003 128	2069.215 380	-0.000 950
76	2061.184 067*	-0.006 355	2069.304 537	-0.000 416
78	2061.060 789*	-0.005 918	2069.392 636	-0.000 455
80	2060.936 472*	-0.006 057	2069.480 838	0.000 099
82	2060.811 311*	-0.006 571	2069.567 683	-0.000 207
84	2060.685 859*	-0.006 901		
86	2060.559 610*	-0.007 546	2069.740 605	-0.000 060
88	2060.433 126*	-0.007 934	2069.825 636	-0.000 636
90	2060.306 068*	-0.008 395	2069.910 847	-0.000 495
92	2060.178 968*	-0.008 388	2069.996 093	0.000 227
94	2060.051 307*	-0.008 420	2070.080 224	0.000 395
96			2070.163 634	0.000 415
98	2059.793 534*	-0.009 316	2070.247 108*	0.001 090

Fortsetzung Tabelle F.5

100	2059.664 260*	-0.009 314	2070.329 868*	0.001 658
102			2070.412 787*	0.003 008
104			2070.493 920*	0.003 217
106			2070.575 392*	0.004 429
108			2070.656 311*	0.005 775
110			2070.736 841*	0.007 443
112			2070.816 749*	0.009 226