

## Zusammenfassung (Dissertation TU Berlin 1993)

Bokelmann, Frank:

### Laserspektroskopische Untersuchung des A-X-Übergangs des van der Waals-Moleküls Kalium-Argon

Es wird über die laserspektroskopische Untersuchung des Elektronengrundzustands  $X\ 2\Sigma^+$  und des ersten angeregten Zustands  $A\ 2\Pi$  des van der Waals-Moleküls Kalium-Argon (KAr) berichtet. Die KAr-Moleküle wurden durch die Expansion eines Gemisches von Argon und Kaliumdampf in einer Düse erzeugt und im Überschallstrahl mit der Strahlung eines kontinuierlichen, schmalbandigen Farbstofflasers angeregt. Im Spektralbereich zwischen  $12870$  und  $13040\text{ cm}^{-1}$  wurde das Anregungsspektrum des KAr rotationsaufgelöst aufgenommen. Die aufgefundenen Banden verbinden die Schwingungsniveaus  $v'' = 0, \dots, 3$  des Grundzustands mit den Schwingungsniveaus  $v' = 6, \dots, 11$  des angeregten Zustands. Die Rotationsstruktur der Banden wurde mit Hilfe von optisch-optischen Doppelresonanzmethoden einschließlich der Zweistufenanregung aufgeklärt. An die rovibronischen Niveaus der Elektronenzustände wurden mit der Schrödinger-Gleichung analytische Potentialfunktionen angepaßt. Zusätzlich wurde der abstoßende Ast des Grundzustandspotentials an die Strukturen kontinuierlicher Fluoreszenzspektren angepaßt, die von selektiv angeregten rovibronischen Zuständen aufgenommen wurden. Für die Beschreibung des  $X\ 2\Sigma^-$ -Zustands eignete sich ein modifiziertes Hartree-Fock-Dispersionpotential, für die des  $A\ 2\Pi$ -Zustands Tang-Toennies-Potentiale. Die rovibronischen Niveaus des  $A\ 2\Pi_{1/2}$ -Zustands wurden bei gleichzeitiger Anpassung eines Lennard-Jones-Potentials für den  $B\ 2\Sigma^+$ -Zustand im resultierenden adiabatischen Potential reproduziert. Die Gleichgewichtsabstände und die Potentialtiefen der ermittelten Potentiale wurden durch die Dunham- und die Long-Range-Entwicklung bestätigt. Darüber hinaus wurden die rovibronischen Niveaus des KAr durch prädissoziierende  $A\ 2\Pi_{3/2}$ -Zustände an das Termschema des Kaliumatoms angebunden. Die Tiefe des Grundzustandspotentials, die dadurch mit einer vergleichsweise hohen Genauigkeit berechnet wurde, bestätigte die auf anderen Wegen ermittelten Werte.

Die in dieser Arbeit ermittelten Gleichgewichtsabstände  $R_e$  und Potentialtiefen  $D^e$  der direkt untersuchten Zustände betragen in befriedigender Übereinstimmung mit Literaturwerten:

$X\ 2\Sigma^+$	:	$R_e = 540,4\ (5)\text{ pm}$ ,	$D^e = 39,9\ (5)\text{ cm}^{-1}$ ,
$A\ 2\Pi_{3/2}$	:	$R_e = 334\ (3)\text{ pm}$ ,	$D^e = 427\ (15)\text{ cm}^{-1}$ ,
$A\ 2\Pi_{1/2}$	:	$R_e = 337\ (3)\text{ pm}$ ,	$D^e = 405\ (15)\text{ cm}^{-1}$ .