

Kurzzusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden verschiedene Eigenschaften des instabilen und daher nur schwer zu fassenden Moleküls HSOH untersucht. HSOH ist sowohl als Oxadisulfan als auch als Wasserstoff-thio-peroxid bekannt. Es ist das Bindeglied zwischen den gut bekannten Molekülen HSSH, Disulfan, und HOOH, Wasserstoffperoxid. HSOH ist nicht nur auf Grund seiner Bedeutung im Rahmen der Verbrennungstheorie von Schwefel, dem Schwefelkreislauf in der Atmosphäre und als mögliches Molekül im Interstellaren Medium interessant, sondern vor allem auch aus spektroskopischer Sicht wegen seiner fundamentalen Eigenschaften.

HSOH repräsentiert mit zwei verschiedenen rotierenden Gruppen, SH und OH, den allgemeinsten Fall eines Ketten-Moleküls mit vier Atomen, welches die Eigenschaft einer internen Rotation aufweist. Um weitere Daten, die für das theoretische Verständnis dieses Effektes nötig sind, zu erhalten, wurden frühere Untersuchungen von Winnewisser *et al.*¹ im Rahmen dieser Arbeit in den THz-Bereich ausgedehnt.

Die im Rahmen dieser Arbeit präsentierte Entdeckung des einfach deuterierten Oxadisulfan, HSOD, ebnete den Weg zur Bestimmung einer semi-experimentellen Gleichgewichtsstruktur von HSOH. Um mehr über die dynamischen Eigenschaften des Moleküls zu erfahren, wurden die Messungen in den Infrarot-Bereich ausgedehnt. Im Rahmen dieser Messungen konnten zwei Schwingungsbanden den hochfrequenten Streckschwingungen ν_{OH} und ν_{SH} zugeordnet werden. Die Analyse der beiden Banden zeigt, dass HSOH im Fall der OH-Streckschwingung ein verhältnismäßig starres "Lehrbuch"-Molekül ist. Im Gegensatz hierzu zeigt der Zustand mit $\nu_{SH} = 1$ eine starke Potentialkopplung mit einem weiteren, nicht näher bekannten Zustand.

Als weiteres Ergebnis dieser Arbeit zeigt sich, dass die Rotationsübergänge im Spektrum von HSOH für $K_a > 3$ eine nicht erwartete Intensitätsverteilung aufweisen. Ein ähnlicher Effekt ist noch nicht in der Literatur beschrieben. Dennoch scheint es sich nicht um eine spezielle Eigenschaft von HSOH zu handeln, sondern vielmehr um ein generelles Phänomen von hoher spektroskopischer Bedeutung.

¹G. Winnewisser, F. Lewen, S. Thorwirth, M. Behnke, J. Hahn, J. Gauss, E. Herbst. Gas-Phase detection of HSOH: Synthesis by Flash Vacuum Pyrolysis of di-*tert*-butyl-sulfoxide and rotational-torsional spectrum. *Chem. Eur. J.* **9** (2003) 5501–5510.