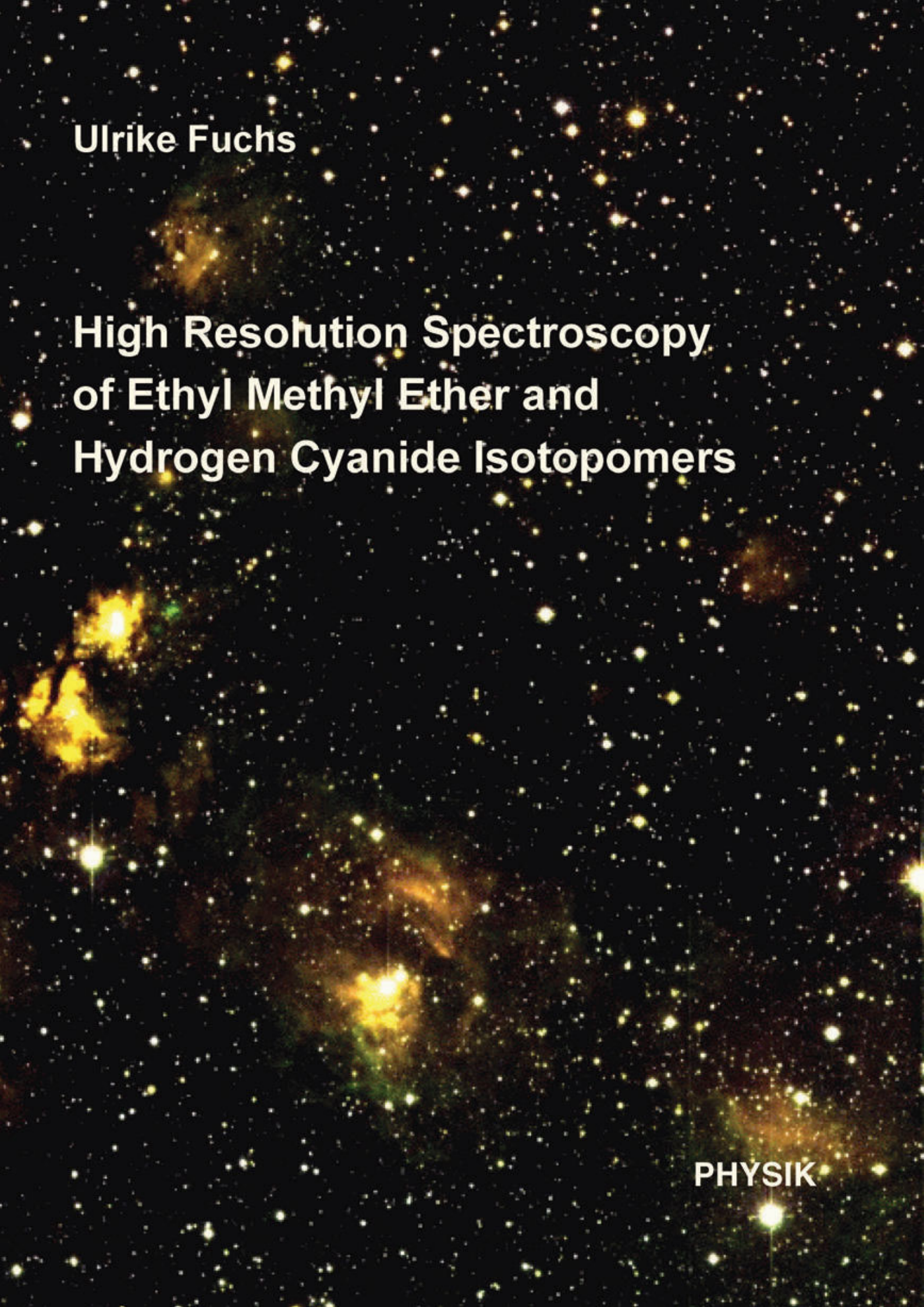




Ulrike Fuchs

**High Resolution Spectroscopy
of Ethyl Methyl Ether and
Hydrogen Cyanide Isotopomers**

PHYSIK

High Resolution Spectroscopy of Ethyl Methyl Ether and Hydrogen Cyanide Isotopomers

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität zu Köln

vorgelegt von

Ulrike Fuchs
aus St. Tönis

Köln 2002

Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2003

Zugl.: Köln, Univ., Diss., 2003

ISBN 3-89873-744-6

Berichterstatter:

Prof. Dr. G. Winnewisser

Prof. Dr. A. Freimuth

Tag der mündlichen Prüfung:

10.02.2003

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2003

Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen

Telefon: 0551-54724-0

Telefax: 0551-54724-21

www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2003

Gedruckt auf säurefreiem Papier

ISBN 3-89873-744-6

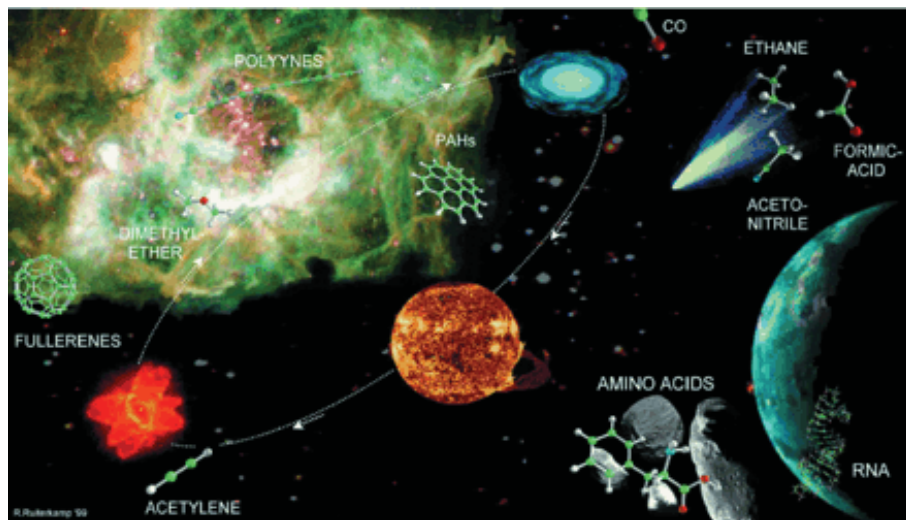
Berichterstatter:

Prof. Dr. G. Winnewisser

Prof. Dr. A. Freimuth

Tag der mündlichen Prüfung:

10.02.2003



“The cycle of organic molecules in the universe”
 (taken from [Ehrenfreund and Charnley, 2000])

For my parents Christel and Josef Feldt

Abstract

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 H^{13}CN , $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$, and HC^{15}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 $J = 24 \leftarrow 23$. 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.

Kurzzusammenfassung

In dieser Arbeit wurden erstmals, mittels hochauflösender Rotationsspektroskopie, 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 wor-

den. 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 H^{13}CN , $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$ und HC^{15}N , konnte ein genauere Datensatz im Grund- und ersten angeregten Knickschwingungszustand ($v_2 = 1$) berechnet werden. Hierzu wurden zwei verschiedene Spektroskopiemethoden verwendet, die "höchstaufauflösende" Sub-Doppler Spektroskopie und die Doppler-limitierte Rotations-spektroskopie. 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 $J = 24 \leftarrow 23$ 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 H^{13}CN , $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$ und HC^{15}N wird in der "Cologne Database for Molecular Spectroscopy" (CDMS) zur Verfügung gestellt.

Contents

Abstract / Kurzzusammenfassung	i
List of Figures	v
List of Tables	ix
Zusammenfassung	xi
1. Introduction	1
2. Spectrometers	5
2.1. The Cologne Spectrometers	6
2.2. The FASSST Spectrometer	9
 I. Ethyl Methyl Ether (C₂H₅OCH₃)	 15
3. Ethyl Methyl Ether, an Asymmetric Top Molecule	17
3.1. Structure of <i>trans</i> -Ethyl Methyl Ether	17
3.2. Energy Levels of the Asymmetric Rotor	19
3.3. Asymmetry of Ethyl Methyl Ether	21
4. Internal Rotation of Ethyl Methyl Ether	29
4.1. Molecules with One Internal Rotor	30
4.2. Molecules with Two Internal Rotors	36
4.2.1. General Considerations for Dimethyl Ether	36
4.2.2. The Hamiltonian for Ethyl Methyl Ether	37
4.2.3. Localized Wavefunctions	39
4.2.4. Energy Levels and Potential Barriers	40
5. Spectral Analysis of Ethyl Methyl Ether	45
5.1. Spectral Analysis	48
5.1.1. Relative Line Intensities	50
5.1.2. Spectra and Molecular Parameters	52
5.2. Discussion	60

II. Hydrogen Cyanide Isotopomers (H^{13}CN, HC^{15}N, $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$)	65
6. HCN Isotopomers: Theoretical Considerations	67
6.1. Rotational Spectroscopy of the Ground Vibrational State	67
6.2. Rotational Spectroscopy of Excited Vibrational State	70
6.3. Hyperfine Structure (Hfs)	73
6.3.1. Electric Quadrupole Interaction H_{eQq}	75
6.3.2. Nuclear Spin Interaction H_{CI}	78
6.4. Sub-Doppler Spectroscopy	79
6.4.1. Line Broadening	79
6.4.2. Technique of Sub-Doppler Measurements	80
7. HCN Isotopomers: Analysis and Results	85
7.1. Spectral Analysis and Discussion	86
7.2. Molecular Constants for the Ground and First Excited State	91
III. Results and Prospects	95
8. Results and Prospects	97
8.1. Ethyl Methyl Ether	97
8.2. Hydrogen Cyanide	100
IV. Appendix	101
A. Assigned Transitions of Ethyl Methyl Ether	103
B. Assigned Transitions of H^{13}CN, $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$, and HC^{15}N	117
C. Additional Recorded Spectra of H^{13}CN	125
Bibliography	135
Acknowledgments	145
Curriculum Vitae	151

List of Figures

1.1. Molecular structure of ethyl methyl ether	2
1.2. Principal ion-molecule reaction paths leading from methanol and ethanol to ethers	3
2.1. Setup of the Cologne THz Spectrometer	7
2.2. Sub-Doppler spectrum of H^{13}CN ($J = 4 \leftarrow 3$, $v_2 = 1^f$)	8
2.3. Setup of the FASSST spectrometer	10
2.4. Frequency calibration of the FASSST spectrometer	11
2.5. Typical fit of the FASSST data	12
2.6. Portion of the FASSST spectrum of ethyl methyl ether	13
3.1. Molecular structure of ethyl methyl ether in the two different isomers	18
3.2. Asymmetric torsional function for <i>trans</i> -ethyl methyl ether	18
3.3. Asymmetry splitting of ethyl methyl ether (I)	22
3.4. Asymmetry splitting of ethyl methyl ether (II)	22
3.5. Prolate-oblate correlation diagram for $J = 2$	23
3.6. FORTRAT diagram for ${}^r\Delta J_1$ -branches	26
3.7. FORTRAT diagram for Q-branches of ethyl methyl ether (asymmetry)	26
3.8. Distribution of concentration of ethyl methyl ether	27
4.1. Molecular structure of methanol	30
4.2. Potential for one internal rotor with C_{3v} -symmetry	31
4.3. Correlation diagram of internal rotation	33
4.4. Functions $\psi_{v\sigma}^{(K)}$ and $\theta_{vq}^{(K)}$ for a twofold barrier for ($n=2$, $m=1$)	35
4.5. Molecular structure of dimethyl ether and ethyl methyl ether	36
4.6. Potential of ethyl methyl ether in dependency of the angles of internal rotation	38
4.7. Nine potential wells of ethyl methyl ether	39
4.8. Energy level diagram for an asymmetric top with internal rotation . .	42
4.9. Spectrum with internal rotation splitting	43
4.10. Graphical representation of the internal rotation modes ($\sigma_1\sigma_2$) of ethyl methyl ether	43
5.1. Ethyl methyl ether, geometrical structure and illustration of the in- ternal parameters	46
5.2. FORTRAT diagram of the Q-branch of ethyl methyl ether (analysis)	49
5.3. FORTRAT diagrams for ${}^r\Delta J_{K_a}$ - branch	49

5.4.	Three torsional quartets from the ${}^rQ_1(J_{1,J})$ - branch	53
5.5.	Three torsional quartets from the ${}^rQ_1(J_{1,J-1})$ - branch	54
5.6.	Internal rotation diagrams of Q-branches $J_{1,J}$, $J_{2,J-1}$, and $J_{3,J-2}$	57
5.7.	Internal rotation diagrams of Q-branches $J_{0,J}$ and $J_{1,J-1}$	58
5.8.	Internal rotation diagrams of Q-branches $J_{2,J-2}$ and $J_{3,J-3}$	59
6.1.	Molecular structure of HCN	68
6.2.	Energy level diagram of $H^{13}CN$ in the ground vibrational state	69
6.3.	Population distribution of $H^{13}CN$ at 298 K	70
6.4.	Coupling scheme of HCN: The rotational (R) and vibrational (l) angular momentum couple to give J	71
6.5.	Energy level diagram for the first excited vibrational state of $H^{13}CN$	73
6.6.	Coupling scheme of nucleus quadrupole coupling with rotating molecule	74
6.7.	Energy level diagram of $H^{13}CN$, including hyperfine structure	77
6.8.	Lamb Dip in a Doppler broadened line profile	83
7.1.	Hyperfine splitting in dependence of J for $H^{13}CN$ for the ground vibrational state $v_2 = 0$	86
7.2.	$H^{13}CN$ - $(v_1, v_2, v_3) = (0, 0, 0)$: Lamb Dip spectrum of the $J = 2 \leftarrow 1$ rotational transition	87
7.3.	$H^{13}CN$ - $(v_1, v_2, v_3) = (0, 0, 0)$: The $J = 3 \leftarrow 2$ rotational spectrum shows five hyperfine components	87
7.4.	$H^{13}CN$ - first excited state ($v_2 = 1^e$): Lamb Dip spectrum of the $J = 4 \leftarrow 3$ rotational transition	88
7.5.	$H^{13}CN$ - first excited state ($v_2 = 1^f$): Lamb Dip spectrum of the $J = 4 \leftarrow 3$ rotational transition	88
7.6.	$HC^{15}N$ - first excited state ($v_2 = 1^f$): Lamb Dip spectrum of the $J = 9 \leftarrow 8$ rotational transition	89
7.7.	$H^{13}C^{15}N$ - first excited state ($v_2 = 1^f$): $J = 9 \leftarrow 8$ transition in Sub-Doppler resolution	89
7.8.	$H^{13}CN$ - ground state: The $J = 7 \leftarrow 6$ rotational spectrum shows five components	90
7.9.	$H^{13}C^{15}N$ - first excited state ($v_2 = 1^f$): Doppler spectrum of the $J = 24 \leftarrow 23$ rotational transition, recorded with COSSTA	90
8.1.	Q-branch transition $J = 34$, $K_a = 4 \leftarrow 3$ of ethyl methyl ether towards G34.26	98
8.2.	Q-branch transition $J = 34$, $K_a = 4 \leftarrow 3$ of ethyl methyl ether towards W51e2	98
8.3.	The IRAM 30m telescope in Granada, Spain and the 15m telescope SEST in La Silla, Chile	100
C.1.	$H^{13}CN$ - ground state $(v_1, v_2, v_3) = (0, 0, 0)$: The $J = 1 \leftarrow 0$ rotational spectrum	125
C.2.	$H^{13}CN$ - ground state $(v_1, v_2, v_3) = (0, 0, 0)$: The $J = 2 \leftarrow 1$ and $J = 3 \leftarrow 2$ rotational spectrum	126

C.3. H^{13}CN - ground state $(v_1, v_2, v_3) = (0, 0, 0)$: The $J = 4 \leftarrow 3$ up to $J = 6 \leftarrow 5$ rotational spectrum	127
C.4. H^{13}CN - ground state $(v_1, v_2, v_3) = (0, 0, 0)$: The $J = 7 \leftarrow 6$ up to $J = 9 \leftarrow 8$ rotational spectrum	128
C.5. H^{13}CN - first excited state $(v_2 = 1^e)$: Lamb Dip spectrum of the $J = 2 \leftarrow 1$, $J = 3 \leftarrow 2$, and $J = 5 \leftarrow 4$ rotational transitions	129
C.6. H^{13}CN - first excited state $(v_2 = 1^f)$: Lamb Dip spectrum of the $J = 2 \leftarrow 1$, $J = 3 \leftarrow 2$, and $J = 5 \leftarrow 4$ rotational transitions	130
C.7. H^{13}CN - first excited state $(v_2 = 1^e)$: Lamb Dip spectrum of the $J = 4 \leftarrow 3$ rotational transition	131
C.8. H^{13}CN - first excited state $(v_2 = 1^f)$: Lamb Dip spectrum of the $J = 4 \leftarrow 3$ rotational transition	131
C.9. H^{13}CN - first excited state $(v_2 = 1^e)$: Lamb Dip spectrum of the $J = 6 \leftarrow 5$, $J = 8 \leftarrow 7$, and $J = 9 \leftarrow 8$ rotational transitions	132
C.10. H^{13}CN - first excited state $(v_2 = 1^f)$: Lamb Dip spectrum of the $J = 6 \leftarrow 5$, $J = 8 \leftarrow 7$, and $J = 9 \leftarrow 8$ rotational transitions	133
C.11. H^{13}CN - first excited state $(v_2 = 1^f, 1^e)$: Lamb Dip spectrum of the $J = 7 \leftarrow 6$ rotational transition	134

List of Tables

3.1. C_s point group	19
3.2. Character Table of the Four Group	20
3.3. Selection rules of an asymmetric rotor	24
4.1. Symmetry of internal rotor states	41
5.1. Atom coordinates of <i>trans</i> -ethyl methyl ether	46
5.2. Electric dipole moment components of ethyl methyl ether	48
5.3. Character table of the group G_{18}	50
5.4. Labelling of atoms used for the permutation group G_{18}	51
5.5. Number of elements of three different symmetry operations	51
5.6. Total spin weight for the total wave function Ψ_{total}	52
5.7. Parameter set of ethyl methyl ether	60
5.8. Partition function for ethyl methyl ether	62
5.9. Predicted transition frequencies of ethyl methyl ether in the vibrational-torsional ground state	63
7.1. Molecular constants of HC^{15}N	92
7.2. Molecular constants of $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$	92
7.3. Molecular constants of H^{13}CN	93
8.1. Sources, source characteristics, and selected telescopes for the search of ethyl methyl ether.	99
8.2. Rotation temperatures (T_{rot}), column densities (N), and relative abundance to molecular hydrogen H_2 (X)	99
A.1. Assigned and fitted frequencies of ethyl methyl ether in the ground vibrational state	103
B.1. Sub-Doppler spectrum of H^{13}CN , $v_2 = 0$	117
B.2. Sub-Doppler spectrum of H^{13}CN , $v_2 = 1$	119
B.3. Sub-Doppler spectrum of HC^{15}N , $v_2 = 0, 1$	123
B.4. Sub-Doppler spectrum of $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$, $v_2 = 0, 1$	124

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Messungen und Analysen von sehr frequenzgenauen und hochaufgelösten Rotationsübergängen von Blausäure-Isotopen (H^{13}CN , $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$ und HC^{15}N) und Ethyl Methyl Ether ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_3$) zwischen 60 GHz und 2 THz vorgestellt.

Hochauflösende Rotationsspektren von Ethyl Methyl Ether wurden erstmalig in der Gasphase zwischen 60 und 350 GHz mit Hilfe verschiedener Spektrometer wie dem Kölner THz Spektrometer und dem Fast Scan Submillimeter Spectroscopy Technique (FASSST) Spektrometer an der Ohio State University in Columbus (Ohio) gemessen. Diese Spektrometer ermöglichten die Messung und Analyse des sehr komplexen Spektrums von Ethyl Methyl Ether mit hoher Präzision. Hierbei diente das Kölner THz Spektrometer zur hochpräzisen Messung von einzelnen Rotationsübergängen und das FASSST Spektrometer zur Aufnahme detaillierter spektraler Informationen über einen großen Frequenzbereich in sehr kurzer Zeit (10 GHz/s). Es wurden für das Spektrometer in Köln bzw. Columbus Frequenzgenauigkeiten in Dopplerauflösung von 50 kHz bzw. 100 kHz erreicht.

Desweiteren wurden höchstauflösende Sub-Doppler Spektren angereicherter Blausäure-Isotope mit dem Kölner THz Spektrometer bei einer Frequenzgenauigkeit von ~ 5 kHz detektiert. Messungen bei 1.8 - 2 THz wurden mit dem Cologne Sideband Spectrometer for Terahertz Application (COSSTA) in Doppler-Auflösung bei einer Frequenzgenauigkeit von ~ 50 kHz aufgenommen.

Die verwendeten Spektrometer basieren auf der Verwendung von Rückwärtswellenoszillatoren (engl. Backward Wave Oscillators, BWOs) als Strahlungsquelle. Sie unterscheiden sich jedoch untereinander grundlegend in der Verwendung der BWOs. Mit dem FASSST Spektrometer konnten daher Übergänge bei 130 - 350 GHz gemessen werden (Ausnutzung der spektralen Reinheit der BWOs von 1 kHz), wohingegen die hier vorgestellten Messungen am Kölner THz Spektrometer im Frequenzbereich von 120 GHz bis 960 GHz lagen (Phasenstabilisierung der BWOs). Schließlich diente COSSTA zur Datenaufnahme in dem zur Zeit noch sehr schwer zu erschließenden Bereich zwischen 1.8 und 2 THz (Mischung des BWOs mit einem frequenzstabilisierten Ferninfrarot-Laser).

Für die hier behandelten Moleküle wurden folgende Ergebnisse erzielt:

Ethyl Methyl Ether ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_3$): Ethyl Methyl Ether ist gekennzeichnet durch seine Asymmetrie wie auch durch die Drehbarkeit seiner internen Rotoren (Methyl-Gruppen), die eine Aufspaltung der Energieniveaus bewirken. Aufgrund der Verwendung eines von [Groner, 1997] entwickelten effektiven Hamiltonians konnte ein neuer, umfangreicher Parametersatz bestimmt werden, der sowohl die Rotation dieses asymmetrischen Moleküls wie auch die internen Rotationen der zwei Methyl-

Gruppen beschreibt und außerdem die Vorhersage von zusätzlichen nicht gemessenen Übergängen von 30 bis zu 400 GHz erlaubt. Durch diesen Parametersatz war die Zuordnung von über 1000 neuen und ~ 100 schon bekannten Übergängen möglich. Einer Entdeckung von Ethyl Methyl Ether im interstellaren Medium sollte, aufgrund dieses neuen zuverlässigen Datensatzes, nichts mehr im Wege stehen. Die Suche wurde im Rahmen dieser Arbeit, mit dem IRAM 30m Teleskop in Granada, begonnen. Vier beobachtete Frequenzen bei 81.2 , 91.6, 91.7 und 150.7 GHz konnten im massereichen Sternentstehungsgebiet G34.26 mit Rotationsübergängen von Ethyl Methyl Ether in Übereinstimmung gebracht werden und erlauben eine vorläufige Zuordnung dieser Linien zu Ethyl Methyl Ether.

Blausäure Isotopomere ($\text{H}^{13}\text{C}^{14}\text{N}$, $\text{H}^{13}\text{C}^{15}\text{N}$ und $\text{H}^{12}\text{C}^{15}\text{N}$): Ziel dieser Arbeit war die Zusammenstellung eines sehr genauen Datensatzes für die Blausäure-Isotope im Grund- und ersten angeregten Knickschwingungszustand ($v_2 = 1$). Hierzu wurden zwei verschiedene Spektroskopiemethoden verwendet, die höchstauflösende Sub-Doppler Spektroskopie und die Doppler-limitierte Spektroskopie. Mit Hilfe der Sub-Doppler Spektroskopie konnten die elf niedrigsten Rotationsübergänge im Grund- und angeregten Knickschwingungszustand gemessen werden. Die Messungen umfassen den Frequenzbereich von 86 GHz bis 960 GHz und zeigen für diese Moleküle erstmals die Hyperfeinstruktur bezüglich des Kernspins von ^{14}N bis zum Rotationsübergang $J = 9 \leftarrow 8$. Starke Übergänge weisen eine Frequenzgenauigkeit von bis zu 3 kHz auf. Mit Hilfe der Doppler-limitierten Spektroskopie wurden im Frequenzbereich zwischen 1.8 und 2 THz vier Übergänge bis zum Rotationsübergang $J = 24 \leftarrow 23$ gemessen. Die Genauigkeit dieser Messungen lag bei 30 kHz. Die neu gewonnen Daten wurden mit schon bekannten Messungen kombiniert ausgewertet und liefern einen sehr genauen Parametersatz für die drei hier untersuchten Isotope von HCN im Grund- und ersten angeregten Knickschwingungszustand.