

Anhang

A.1 Molekülparameter zu den RRKM-Rechnungen

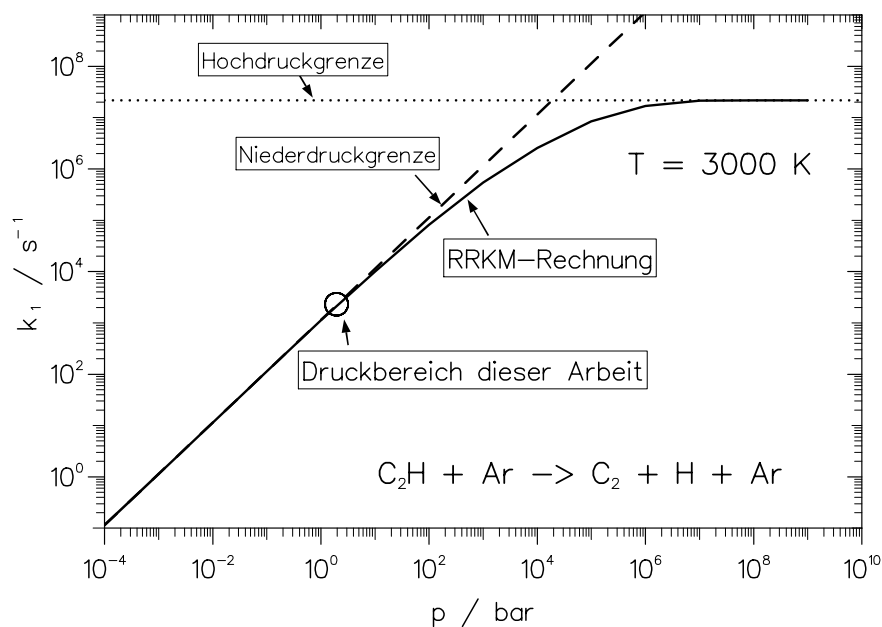
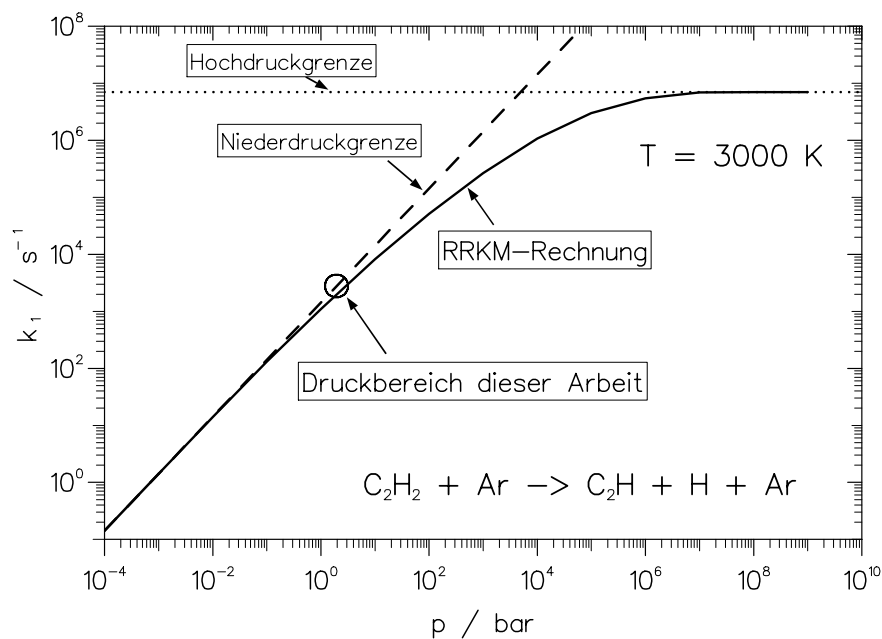
$C_2H_2 + Ar \rightleftharpoons C_2H + H + Ar$:

Schwingungsfrequenzen, C_2H_2 / cm^{-1} :	3374, 3282, 1974, 729(2), 612(2)
Schwingungsfrequenzen, Übergangszustand / cm^{-1} : (Abschätzung ausgehend von C_2H , siehe Kap. 2.1.2)	3328, 1841, 372(2), 90(2)
Rotationskonstante, C_2H_2 :	$B_{C_2H_2} = 1.183 \text{ cm}^{-1}$
Rotationskonstante, Übergangszustand / cm^{-1} : (Ermittelt durch Variationsprinzip: Minimierung von k_{uni}^∞ über r_{HCC-H} , siehe Kap. 2.1.2)	$B_{HCC-H} = 0.548 \text{ cm}^{-1}$
Lennard-Jones-Parameter von C_2H_2 und Ar:	siehe Tab. 2.1, Kap. 2.1.2.
Dissoziationsenergie:	$D_0(HCC-H) = 550.2 \text{ kJ/mol}$

$C_2H + Ar \rightleftharpoons C_2 + H + Ar$:

Schwingungsfrequenzen, C_2H / cm^{-1} :	3328, 1841, 372(2)
Schwingungsfrequenzen, Übergangszustand / cm^{-1} : (Abschätzung ausgehend von C_2)	1641, 90(2)
Rotationskonstante, C_2H :	$B_{C_2H} = 1.475 \text{ cm}^{-1}$
Rotationskonstante, Übergangszustand / cm^{-1} : (Ermittelt durch Variationsprinzip: Minimierung von k_{uni}^∞ über Variation von r_{CC-H})	$B_{CC-H} = 0.650 \text{ cm}^{-1}$
Lennard-Jones-Parameter von C_2H und Ar:	siehe Tab. 2.1, Kap. 2.1.2.
Dissoziationsenergien:	$D_0(CC-H) = 479.0 \text{ kJ/mol}$ und $D_0(CC-H) = 456.0 \text{ kJ/mol}$

A.2 RRKM-Rechnungen zur Druckabhängigkeit des C_2H_2 - und C_2H -Zerfalls.



Standard-RRKM-Rechnungen mit den in Anhang A1 angegebenen Parametern zur Druckabhängigkeit des C_2H_2 - und C_2H -Zerfall. Zusätzlich sind der Hoch- und Niederdruckbereich sowie der Druckbereich dieser Arbeit angezeigt.