

P20

P₂O

A. Gatterer, S.J., J. Junkes S.J.
E.W. Salpeter S.J.

Molecular spectra of metallic
oxides. 1957. Spec. Vaticane

13 спектров в области 0-0: 8488^g, 7866^g,

7662, 7668, 7320^g, 6924^g, 6822, 6589

6474, 6019^g, 5763, 5694, 5352.0

5137.3

Совещание на Jarrel-Asl - 5^А_м + работе

Watson's 12 человек
привезли анализ Рохена и Swensson'a ф., который
не для дальнейшего существования.

S. Hautesler (защитное общество) привел различные
анализы в р. ер. по моему списку 8488 и другие
в переходе $2\Sigma - 2\Sigma$.

CeO

PrO

W. W. Watson

1938

Phys. Rev. 53, 639, 1938

Спектры монооксида Ce и Pr.

Дуга

21 ft решетка

 ω_e' $\omega_{ex'e}'$ ω_e'' $\omega_{ex'e}''$

CeO

A

12803.9

785.3

2.13

863.4

2.68

B

13855.2

788.3

1.76

866.7

3.30

D

20580.3

791.7

1.72

838.9

2.92

E

20880.3

807.9

2.04

841.4

2.24

PrO

18704.5

769.0

1.92

818.9

1.20

Pro

Cell. V

1952

A. Gatterer, S. G. Krishnamurty

Spec. nemica
Cal. et al.

J. Opt. Soc. Am. 1952, 42 143

The spectrum of the "Carbon flame" from a purefield carbon rod impregnated with a solution of pure (Hilger) praseodymium oxide in hydrochloric acid, excited by a current of 60 amp at 15 volts, was photographed in the visible, red and infrared regions using a Zeiss-3 prism spectrograph. Exposures of about 20 seconds registered three band systems almost free from atomic

2. Jerous. Proc. Phys. Soc. (London), 41, 520,
1929.

lines, on Eastman Kodak spectro-
scopic plates - J-N.

Vibrational analysis of the band heads of the
orange system with sequence starts at ν
17618 and ν 17863 revealed the two components
of the $C2\Sigma - X2\Sigma$ transition (c.f. LaO^2) in praseodi-
mium monoxide. The value (~ 873) of ω_e is com-
parable with the lower state vibrational
frequencies 865, 841 and 842 of cerium-,
gadolinium-, and lutetium-monoxide of the
group of rare earth elements. Full de-
tails of the three systems obtained will
be reported elsewhere.

PzO

R. Herzmann

Flammenphotometrie, 1956

Springer-verlag - Berlin-Göttingen-Heidelberg

Приведены 27 новых PzO, которые излучают
лучи в пламени на приборах с
крупной дисперсией.

PrO

Gatterer A., Junkes J., 1957

Salpeter E.W.

Mol. Spectra of Metallic
Oxides (1957) Specola Vaticana

PrO (Do)

1961₂

Walsh P. N., Dever D. F., White D.,

J. Phys. Chem., 65, 1410 (1961₂)

7.4 ± 0.3 эв.

поэтому в списке у меня
значение 7.7 эв. $? \pm 0.3$ эв.



1961

12 5 356

PrO

Walsh Patrick N. u. gp.

~~(No)~~

"J. Phys. Chem" 1961, 65, w8,
1400-1413

~~(coll. Lang Oz)~~

2. 1962. 12



(coll. Geo; III)

P₂O

R. Marrodianu, H. Boiteux 1965

Flame Spectroscopy 1965

John Wiley:

N. Y. London: Sydney.

Данная книга P₂O и другие спектры
Guthrie's (1956).

ReO Ames. L.L., P.N. Walsh., & White 1964.

J. Phys. Chem., 71, 2707, 1967.
2714.

D_0^0 ~~XXI~~ $\frac{391}{22}$ $\bar{X}$ $\frac{57}{3.9}$

Rare Earths. IV. Dissociation
Energies of the Caseous Monoxides
of the  Rare Earths.

Pro

Fries J. A.

201

См. перебор в пер.

Cater E.D.

Do

Nucl. Sci. Abstr,

1969, 23, N14, 2621/3

см H/O.

P₂O

1969

Leo Brewer, Gerd Rosenblatt.

"Adv, in High Temp. Chem."

1969. 2, I-83.

D₂^o

D₂^o

order rec 1969

PrO ommeu 7573 ^{noce}
1969

De Maria G.

(Do) 2° Simposio Internazio-
ne di dinamica delle
Reazioni chimiche su le
fiamme Auali Reazioni
in flusso.

1969

PrO

Do

7213R Vaporization and thermodynamics of the praseodymium and gadolinium sulfides, Pr_2S_3 and GdS , and the dissociation energy of praseodymium oxide, PrO . Fries, James A. (Univ. of Iowa, Iowa City, Iowa). 1969, 180 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 70-4360. From *Diss. Abstr. Int. B* 1970, 30(9), 4080-1. SNDC

+2 I



C.A. 1971. 74. 2

MO

Fries Y.A.,
Cater E.D.

1969

D₀⁰

Neel. Sci. Abstr.,
1969, 23, ~ 14, 26213

(Cen ~~PS~~) IV

FeS; GdS; FeO; VS; VO (Do°)

1969

Fries J. A.; Cater E. D.

VIII 3573

U. S. At. Energy Comm. 1969, COO-
-4182-275 43pp.

Mass spectrometric determination
of dissociation energies of
FeS; GdS, and FeO.

60
9
CA, 1969, XI, No. 95680*

$\text{ScF}_3, \text{YF}_3, \text{NdF}_3, \text{SmF}_3, \text{EuF}_3,$
 $\text{GdF}_3, \text{DyF}_3, \text{HoF}_3, \text{ErF}_3$
 $\text{ScO}, \text{YO}, \text{YS}, \text{LaO}, \text{LaS}, \text{CeO},$
 $\text{PrO}, \text{VO},$

$\text{M}_2\text{F}_2\text{M}_2\text{F}_2$ $\text{F}_2\text{M}-\text{F}, \text{Y}$	1970 8
---	-----------

7

22 VII 3761.

Таркин О. П.,
 Изв. Акад. Наук СССР, Хим., 1970, №1, 4-6
 Важнейшие свойства атомов и
 свойства неорганических соединений.
 Термическое разложение соединений и их
 свойства. Свойства соединений металлов и неметаллов.
 Свойства соединений металлов и неметаллов.
 Свойства соединений металлов и неметаллов.

1970. 72, №22, 11497/12

1971

Di, сраемии (CeO_2 , PrO_2 , TeO_2)

Di (CeO , PrO , NdO , SmO , GdO , TbO , DyO ,
 HoO , ErO , TmO , LuO).

De Kock R.L., Weltner W., ¹² ⁸ $\bar{v}$ 4314
J. Phys. Chem, 1971, 75, 4, 514-525 (англ.)

Spectroscopy of rare earth oxide
molecules in inert matrices at 4°K.

Рис. 9, 1971, 80419

ЕСТЬ ОПЕТИЧ. (с)

$\text{CeO}_2, \text{PrO}_2, \text{TbO}_2 (V_i)$ 8 1974

$\text{CeO}, \text{PrO}, \text{TbO}, \text{LaO}, \text{GdO}, \text{NdO}, \text{SmO},$
 $\text{DyO}, \text{HoO}, \text{ErO}, \text{TmO}, \text{LuO} (w_e).$

VII 4477 (Cuepp & Maffey)

Weldner W., DeKock R. L. (anna)

J. Chem. Phys., 1971, 55 (4), 514-25

Spectroscopy of rare earth oxide
molecules in $\bigcirc$ inert matrices at 4K
10 Ca 20 Ca 1970, 74 (20), 1050-8c

PrO

ВФ- VIII-5814

1972.

6 Б135. Эмиссионный спектр молекулы PrO. Venkitachalam T. V., Krishnamurty G., Nagarajsimham N. A. Emission spectrum of PrO. «Proc. Indian Acad. Sci.», 1972, А76, № 3, 113—120 (англ.).

Исследован эмиссионный спектр молекулы PrO в дуге постоянного тока. Идентифицирована вращательная структура полос с центрами при 8488,95, 7986,44 и 7662,85 А и показано, что первые две полосы относятся к переходам $A^2\Delta_{5/2}(v'=0; 1) \rightarrow X^2\Pi_{3/2}(v''=0)$, а третья — к переходу $B^2\Delta_{5/2}(v'=0) \rightarrow X^2\Pi_{3/2}(v''=0)$.

М. Р. Алиев

Х. 1973. № 6

PrO

89-VIII-5314

1972.

u.n.

4845x Emission spectrum of praseodymium monoxide. Venkitachalam, T. V.; Krishnamurty, G.; Narasimham, N. A. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Trombay, India). *Proc. Indian Acad. Sci., Sect. A* 1972, 76(3), 113-20 (Eng). The bands of PrO at 8488.95 and 7986.44 Å of system I and at 7662.85 Å of system III were photographed on a 6.6 meter concave grating spectrograph at a dispersion of 1.2 Å/mm and their rotational structure analyzed. They are assigned transitions from $v' = 0$ and 1 levels of $A^2\Delta_{5/2}$ and $v' = 0$ level of $B^2\Delta_{5/2}$ to a common $v'' = 0$ level of the ground, $X^2\Pi_{3/2}$ state.

C.A. 1973. 78 v10

менави

PrO

ВР - VIII - 5314

1972.

3 Д417. Спектр излучения PrO. Venkitachalam T. V., Krishnamurthy G., Narasimham N. A. Emission spectrum of PrO. «Proc. Indian Acad. Sci.», 1972, A76, №3, 113—120 (англ.)

Спектр излучения молекулы PrO возбуждался в дуге постоянного тока между графитовыми электродами с набивкой Pr_6O_{11} и фотографировался с дисперсией 1,2 Å/мм. Проведен анализ вращательной структуры полос 0—0 (8488,95 Å) и 0—1 (7986,44 Å) системы I и полосы 0—0 (7662,85 Å) системы III. Приведены таблицы частот вращательных линий ветвей P, Q и R и рассчитаны молекулярные константы возбужденных состояний $A^2\Delta_{5/2}$, $B^2\Delta_{5/2}$ и основного $X^2\Pi_{3/2}$. Показано, что системы I и II также как и системы III и IV обусловлены переходами из двух дублетных возбужденных состояний в основное.

В. Александров

м.п.

Ф. 1973. №3.

VIII-5879

1973

PrO

598743y Electronic spectrum of praseodymium monoxide. Shenyavskaya, E. A.; Egorova, I. V.; Lupanov, V. N. (Dep. Chem. Thermodyn., Inst. High Temp., Moscow, USSR). *J. Mol. Spectrosc.* 1973, 47(3), 355-62 (Eng). The emission and absorption spectra of PrO were investigated. At 5000-11,200 Å, the bands of 22 systems were found. The rotational structure of 4 bands belonging to 2 systems was analyzed. In the absorption spectra, there were obsd. transitions from at least 2 electronic states having close values of vibrational and rotational consts.

M. N. T.

Dr. E. N. T.

C. 12. 1973 79 N 16

РчО

VIII-5879

1973

7 Б138. Электронный спектр монооксида празеодима.
 Shenyauskaya E. A., Egorova I. V., Lupa-
 nov V. N. Electronic spectrum of praseodymium mono-
 oxide. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 47, № 3, 355—362
 (англ.)

Электр.
спектр

м.н.

Спектр PrO получен в поглощении (3000—9500 Å) и в испускании (3000—11 200 Å) при нагревании Pr_6O_{11} в печи до 2200°. В области 5000—11 200 Å выделены 22 системы полос и выполнен анализ их колебательной структуры; получены значения $\omega_e'' = 830—836 \text{ см}^{-1}$ и $\omega_e x_e'' = 2—3 \text{ см}^{-1}$. Проведен анализ вращательной структуры четырех полос, сфотографированных с дисперсией 1,5 Å/мм. Показано, что поглощение происходит по крайней мере в двух электронных состояниях; для одного из них (в см^{-1}) $B_0 = 0,3610 \pm 0,0001$; $D_0 = (2,6 \pm 0,3) \times 10^{-7}$, для др. $B_0 = 0,3620 \pm 0,0001$, $D_0 = (2,4 \pm 0,3)^{-7}$; полосы отнесены к переходам с $\Delta\Omega = 1$ (случай связи «с» по Гунду). Д. И. Катаев

X. 1974 N 7

VIII-5879

1973

PrO

3 Д333. Электронный спектр PrO . Shen'yavskaya E. A., Egorova I. V., Lupa'nov V. N. Electronic spectrum of praseodymium monoxide. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 47, № 3, 355—362 (англ.)

Спектры излучения и поглощения PrO в области 500—1200 нм получены с помощью танталовой печи с порошкообразным Pr_6O_{11} в атмосфере аргона, нагреваемой до $1800\text{--}2200^\circ\text{C}$. Измерены кванты-полос, образующих 22 системы электронных переходов PrO . Выполнен анализ вращательной структуры полос $1\text{--}0$, $0\text{--}0$ и $0\text{--}1$ системы VII и полосы $0\text{--}0$ системы X. Нижние состояния этих систем имеют близкие значения колебательных и вращательных констант и являются, по-видимому, компонентами состояния $^2\Phi$, предположительно основного состояния PrO . Библ. 6. В. А.

Электр.
спектр

Ф. 1974 N 3

$\text{PrO}_2, \text{CeO}_2, \text{TbO}_2, \text{ThO}_2$ (Vi, crystal-
nagran.) 1974
 $\text{PrO}, \text{CeO}, \text{TbO}, \text{ThO}$ (w_e, w_{ex}). VII-5998

Gabelnick S.D., Reedy G.T., Chasanov M.G.,

J. Chem. Phys., 1974, 60(3), 1167-71.

Infrared spectra and structure of
some matrix-isolated lanthanide and
actinide oxides.

C.A. 1974.80.N22.126459E 10



PrO

ommuck A-2761

1974

Guido M. Gigli G.,

J. Chem. Phys. 1974,

61 N10, 4138-40

PzO

1974

Gładyszewski L.

Biol. Lubl. Tow. Nauk,
Mat-Fiz-Chem. 1974,
16(2), 93-6.

(J)

(all. CeO) 10

1976

PrO

EuO

ArO

KrO

~~Det. Group~~

Do

86: 180070e Molecular studies of gaseous oxides. Murad, Edmond; Tanaka, Y. (Air Force Geophys. Lab., Hanscom AFB, Mass.). U. S. NTIS, AD Rep. 1976, AD-A033675, 20 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1977, 77(5), 217. A surplus high temp. mass spectrometer was successfully refurbished and put into operation. Preliminary measurements of the dissociation energy of gaseous PrO gave the value of 176.9 ± 3 kcal/mol (or 7.66 ± 0.13 eV). Final anal. of the results on the dissociation energy of gaseous EuO gave the value of 111.9 ± 2.4 kcal/mol (or 4.85 ± 0.10 eV). Preliminary measurements on the vacuum UV spectra of mols. formed with mixts. of Ar + O and of Kr + O were performed. In the case of Kr + O₂ 5 continua with peaks at 1490, 1830, 2090, 2320, and 2520 Å, are obsd.

Vyslasy

C.A. 1977, 86 1124

(+3)

X

РЧО

1976

См. инв. № 59/76

М.Н.

Создание авторитетной
базы данных о свойствах
электрических соединений
переходных металлов
отв. исп. Вейс Ч.В.

PrO

оттиск 6100

1977

10 Д344. Анализ вращательной структуры электронных переходов в PrO , оканчивающихся на основном состоянии. Delavat J. - M., Van Heems J., Beauvils J. - Cl. Analyse rotationnelle de deux transitions électroniques du monoxyde de praseodyme liées à l'état fondamental. «Can. J. Spectrosc.», 1977, 22, № 6, 117—120 (франц.; рез. англ.)

Проведен анализ вращательной структуры фундаментальных эмиссионных полос систем VII и X молекулы PrO в области 7500—8500 Å. Исходя из известных данных по колебательной структуре и положения главных линий в двух полосах системы VII предположено, что наблюдаемые спектры соответствуют переходам, нижние уровни которых являются компонентами состояния $^2\Phi$. Последнее рассматривается как основное состояние PrO .

Резюме

18.05-11/11/XX

М.П.

фр, 1978, 11/10

РЧО

оттиски 6100

1977

17 Б163. Анализ вращательной структуры двух электронных переходов монооксида празеодима в основное состояние. Delaval J.-M., J. Van Heems, Beaufils J.-Cl. Analyse rotationnelle de deux transitions électroniques du monoxyde de praseodyme liées à l'état fondamental. «Can. J. Spectrosc.», 1977, 22, № 6, 117—120 (франц.; рез. англ.)

В области 7500—8500 А сфотографирован спектр испускания молекулы PrO. Проанализирована вращательная структура полос 0—0, 1—0, 1—1, 2—1 системы VII и полосы 0—0 системы X. Значения $\nu_{\text{квант.}}$, ν_0 , B' , D' , B'' , D'' равны соотв. (в см^{-1}): VII, 0—0—11776,7, 11770,41, 0,3412, $1,1 \times 10^{-7}$, 0,3608, $2,9 \times 10^{-7}$; 1—0—12517,65, 12511,39, 0,3415, $2,0 \times 10^{-7}$, 0,3610, 3×10^{-7} ; 1—1—11686,4, 11679,52, 0,3416, $2,4 \times 10^{-7}$, 0,3596, 3×10^{-7} ; 2—1—12422,5, 12416,21, 0,3404, $2,2 \times 10^{-7}$, 0,3597, 3×10^{-7} ; X, 0—0—13046,5, 13038,63, 0,3458, $2,8 \times 10^{-7}$, 0,3617, $2,4 \times 10^{-7}$. Предполагается, что наблюдаемый спектр связан с переходами в различные компоненты состояния $a^2\Phi$, к-рое рассматривается как основное состояние молекулы PrO.

В. М. Ковба

2, 1978, № 17

М. П.

УВМ-2081

PrO

omitted 6100
XVIII - 708j

1977

88: 143721p Rotational analysis of two electronic transitions of praseodymium monoxide connected to the fundamental state. Delaval, J. M.; Van Heems, J.; Beaufils, J. C. (Lab. Spectrosc. Mol. Diatomiques, Univ. Lille 1, Villeneuve d'Ascq, Fr.). *Can. J. Spectrosc.* 1977, 22(6), 117-20 (Fr). A rotational anal. of the principal emission bands of the VII and X systems of PrO at 7500-8500 Å was carried out. The known vibrational assignments and the existence of primary lines in the 2 bands of system VII suggest that the obsd. spectra correspond to transitions whose lower states are components of a 2Φ state which is considered to be the fundamental state of PrO.

M. N.

C.A., 1978, 22, 120

Pp 0

omnibus 4497

1978

Ackermann R. J., Raue E. C.

Rep. int. Hautes. Temp.

Refract., Fr., 1978, vol. 15,
pp 259-80.

Dc

оттиски 7130

1978

PrO

NdO

(20)

(71)

ф. 1979, N3

3 Д103. Строение и энергии диссоциации газообразных окисей празеодима и неодима. Murad Edmond.

The dissociation energies of gaseous praseodymium and neodymium-monoxides and their structure. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 59, № 2, 359—361 (англ.)

Масс-спектрометрическим способом изучены равновесия в газовой фазе при т-рах порядка 1900°K : $M_1 + M_2O \rightleftharpoons M_1O + M_2$, где $M_1, M_2 = \text{Pr, Ti, Nd}$, и получены температурные зависимости констант равновесия, теплоты реакций и энергии диссоциации $D_0^0(\text{MO})$ в кдж/моль: 736,4 (PrO) и 697,0 (NdO) с точностью $\pm 12,6$. Обсуждается возможное строение молекулы PrO. Г. А.

Омичев 713-0

1978

7 Б857. Энергии диссоциации газообразных монооксидов празеодима и неодима и их структура. Mu-grad Edmond. The dissociation energies of gaseous praseodymium- und neodymium-monoxides and their structure. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 59, № 2, 359—361 (англ.)

С помощью масс-спектрометра, оборудованного изготовленной из Мо эффузионной камерой, исследованы газофазные изомолек. р-ции $\text{Pr} + \text{TiO} = \text{PrO} + \text{Ti}$ (1), $\text{Nd} + \text{ScO} = \text{NdO} + \text{Sc}$ (2) и $\text{Nd} + \text{TiO} = \text{NdO} + \text{Ti}$ (3) над системой $\text{Nd}_2\text{O}_3 - \text{Sc}_2\text{O}_3 - \text{Ti}$. В интервале т-р 1800—2000 К получены след. зависимости $\ln K_p$ (1) = $-0,5385 + 10655,1/T$, $\ln K_p$ (2) = $1,9566 + 940,1/T$, $\ln K_p$ (3) = $0,2876 + 4800,5/T$. По 3-му закону величины $-\Delta H_{298}^0$ составили $73,6 \pm 12,6$, $21,8 \pm 12,6$ и $34,3 \pm 12,6$ для (1) — (3), соотв. Из этих данных вычислены $D_0^0(\text{PrO}) = 736,4 \pm 12,6$ и $D_0^0(\text{NdO}) = 697,0 \pm 12,6$ кДж/моль. В рамках ионной модели Риттнера делается вывод о том, что взаимодействие ионов Pr^+ и O^- лучше описывает молекулу PrO , нежели Pr^{++} и O^{--} . Все величины в кДж/моль.

В. В. Чепик

ж. 1979, № 4

PrO

NdO

(D₀)

(+1)



Summary 7130 1948

90: 77314w The dissociation energies of gaseous praseodymium and neodymium monoxides and their structure. Murad, Edmond (Air Force Geophys. Lab., Hanscom AFB, Mass.). *Chem. Phys. Lett.* 1978, 59(2), 359-61 (Eng). $D_0(\text{PrO})$ and $D_0(\text{NdO})$ were detd. mass spectrometrically and found to be 736.4 ± 12.6 and 697.0 ± 12.6 kJ/mol, resp. Ionic contributions to bonding in these mols. are discussed.



C.A. 1949, 90, NdO

Р.О

[У Вейс]

1978

Вейс И. В., Гурьев А. В.

М.И. „Доказательство спектро-
номии. Ядерная физика по
спектральному. Топоним
1977, Ч. 1", М., 1978,
194-220

Сен. Т.О. ; III

PrD

Am. 41 214

1979

Beauregard J. Cl. et al.,

J. Mol. Spectrosc., 1979,

77, 1-10.

New Experimental Results on the
Electronic Spectrum of Praseodymium Monoxide.

summary 8439

7979

PrO

M. M.

91: 65558m New experimental results on the electronic spectrum of praseodymium monoxide. Beaufils, J. C.; Carotte, P.; Blondeau, J. M. (Unites d'Enseignement et de Recherche, Univ. Lille I, F 59650 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 77(1), 1-10 (Eng). New spectra of PrO were investigated under high resolu. in emission and in absorption by means of hollow-cathode and King furnace techniques. The rotational consts. of 2 new systems were detd. Observation of the 1st R lines of the 0-0 bands and the anal. of their hyperfine structure lead to the conclusion that the lower states involved are probably the 2 components of a $^2\Gamma$ state which would be the lower state of red bands already studied and previously assigned as a $^2\Phi$ state.

C. H. 1979/1/18

Оттиск 8439

1979

PrO

1 Д324. Новая экспериментальная информация об электронном спектре PrO. New experimental results on the electronic spectrum of praseodymium monoxide. Beaufils J. Cl., Carrette P., Blondeau J. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 1, 1—10 (англ.)

С использованием печи Кинга и разряда в полом катоде получены спектры поглощения и испускания паров PrO в области 559,7—601,9 нм. Впервые проанализирована вращательная структура полос 0—0 системы XVII и 0—0, 0—1 системы XX (номенклатура соответствует принятой в работе (Shenyavskaya E. A. et al. «J. Mol. Spectr.», 1973, 47, 355—362). Высказано предположение о том, что нижнее состояние, ранее идентифицированное как состояние $^2\Phi$, следует отнести к типу $^2\Gamma$.

Эл. спектр

PrO. 1980. N1

PrO

Электрон.
Спектры

-и.п.

оттиски 843.9

1979

3 Б137. Новые экспериментальные результаты для электронного спектра монооксида празеодима. Beau-
fils J. Cl., Carotte P., Blondeau J. M. New ex-
perimental results on the electronic spectrum of praseo-
dymium monoxide. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 1,
1—10 (англ.)

Измерены электронные спектры испускания и погло-
щения монооксида празеодима PrO. Для получения как
спектров поглощения, так и спектров испускания ис-
пользовалось термич. возбуждение PrO в печи Кинга-
 (испарялась окись празеодима Pr_6O_{11} , $T=2500\text{ K}$, атмо-
сфера Ar—300 мм). В кач-ве источника возбуждения
спектров испускания использовалась также лампа с
полым катодом, охлаждаемым жидк. азотом. Спектры
испускания регистрировали с разрешением 250 000, по-
глощения — 570 000. Наблюдено большое число полос
PrO, принадлежащих различным системам. Проанали-
зирована вращательная структура полос 0—0 ($\lambda=$
=6019 Å) системы XVIII и 0—0 и 1—1 ($\lambda=5597$,
5612 Å) системы XX. Наблюдены линии $I=3$, 5 и $I=$
=4, 5 в R-ветвях полос 0—0 систем XVII и XX соотв.

Х. 1980. №3

Отмечено, что низшие вращательные линии уширены за счет сверхтонкой структуры. Определены молек. постоянные для системы XVII (0—0): $B''=0,3608$ (3), $D''=3,93 \times 10^{-7}$, $B'=0,3534$ (7), $D'=2,08 \times 10^{-7}$, $\nu_0=16591,35$, $\nu_{\text{канта}}=16609,73$ см⁻¹ и для переходов XX (0—0): $B''=0,3620$ (2), $D''=2,40 \times 10^{-7}$, $B'=0,3559$ (7), $D''=2,91 \times 10^{-7}$, $\nu_0=17842,29$, $\nu_{\text{канта}}=17862,85$ см⁻¹ и XX (1—1): $B''=0,3603$ (6), $D''=1,56 \times 10^{-7}$, $B'=$

$=0,3520$ (2), $D'=0,37 \times 10^{-7}$, $\nu_0=17769,22$, $\nu_{\text{канта}}=17814,01$ см⁻¹. Обнаружены возмущения во вращательной структуре обеих систем. Проведен анализ сверхтонкой структуры линий $I=3,5$ и $4,5$ системы XVII и линий $I=4,5$ и $5,5$ системы XX. Определен параметр A , равный $0,24$ см⁻¹. Отмечено, что комбинационные соотношения, полученные для полос XVII и XX, хорошо согласуются с лит. значениями, имеющимися для полос VII и X. На основании анализа полученных данных сделан вывод, что нижними состояниями исследуемых систем являются две компоненты состояния $^2\Gamma$, а не $^2\Phi$, как считалось ранее. Отмечено, что состояние $^2\Gamma$ должно быть нижним и для ранее изученных красных полос.

С. Б. Осин

PrO

1949

9 Б119. О сверхтонкой структуре полос 0—0 в спектрах систем PrO XVII. Dulick M., Field R. W., Beaufils J. Cl. On the hyperfine structure of the 0—0 band in the PrO XVII system. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 78, № 2, 333—334 (англ.)

сверхтонкая
структ.

Показано, что СТС полос 0—0, в полностью разрешенных спектрах флюоресценции системы XVII PrO обусловлена сверхтонким взаимодействием в верхнем (возбужденном) состоянии. Измерены частоты компонент СТС линий R(4,5), P(6,5) и R(6,5) полосы 0—0.

А. М. Евдокимов

офис 888-9

а. 1980. N 9

PrO

number 8889

1979

91: 219805d On the hyperfine structure of the 0-0 band in the praseodymium oxide (PrO XVII) system: Dulick, Michael; Field, Robert W.; Beaufils, J. C. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 78(2), 333-4 (Eng). The XVII system of PrO was examd. at high Doppler-limited resolu. (0.002 cm^{-1}) by recording laser fluorescence excitation spectra with a 1-MHz bandwidth continuous-wave dye laser capable of continuous 30-GHz scans and measurement of low- J lines in both R and P branches show that the dominant hyperfine splitting is in the upper state. Frequencies of completely resolved hyperfine components of the $R(4.5)$, $P(6.5)$, and $R(6.5)$ lines of the XVII 0-0 band are listed. The fact that the hyperfine splitting of the lower electronic state is much smaller than that of the upper state implies that the lower-state configurational assignment of J.C. Beaufils et al. (1979), $2^1\Gamma \text{ Pr}^+ \text{ O}^- (\phi 4f)^3(\sigma 6s)(\pi 2p)^3$, is incorrect.

u. n.
сверхтонкой
структуры

© A. 1979, 9/126

PrO

мтмсм 8889

1979

5 Д326. Сверхтонкая структура полосы 0—0 системы XVII молекулы PrO. On the hyperfine structure of the 0—0 band in the PrO XVII system. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 78, № 2, 333—334 (англ.)

Проанализировано сверхтонкое расщепление линий с малыми J в полосе 0—0 системы XVII молекулы PrO, зарегистрированной с разрешением $0,002 \text{ см}^{-1}$ в спектре возбуждения флуоресценции. Анализ показал, что за сверхтонкое расщепление ответственно верхнее состояние. Полученные результаты свидетельствуют о некорректности идентификации нижнего состояния системы XVII молекулы PrO, предложенной ранее (Beaufils J. Cl., et al., «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, 1).

В. С. Иванов

м, n; ϵ_i

Ф. 1980 N 5

Pr O

1949

Yadav B. R., et al

Curr. Sci. 1949, 48(11),
475-80

nomens.
sp-um, Ds

cell. Lu F - III

PrO

Сттмск 11826

1981

23 Б172. Анализ вращательной и сверхтонкой структуры полосы 0,0 системы XX PrO Dulick Michael, Field Robert W., Beaufils J. Cl. Rotational and hyperfine analysis of the 0,0 band of the PrO XX System. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 87, № 1, 268—277 (англ.)

М.П.

Методом спектроскопии лазерного возбуждения с селективным узкополосным детектированием флуоресценции исследована вращательная и сверхтонкая структура полосы 0—0 системы XX PrO ($\Omega' = 5,5 - \Omega'' = 4,5$). Молекулы PrO, образующиеся при испарении смеси $\text{Pr}_6\text{O}_{11} + \text{Pr}$ ($1300 - 1400^\circ$), захватывались затем пото-

ком аргона ($p_{\text{Ar}} = 1 - 3$ мм). Значения ν_{00} , вращательных постоянных B_0 и D_0 , постоянных СТС d_0 и d_v PrO (в см^{-1}), полученные из спектра возбуждения флуоресценции: $\Omega'' = 4,5 - 0, 0,361918, 1,78 \cdot 10^{-7}, 0,2816, 6,67 \cdot 10^{-5}; \Omega = 5,5 - 17845,373, 0,355904, 2,60 \cdot 10^{-7}, 0,1328, 0$. В спектре флуоресценции, возбуждаемом

X. 1981, 12, № 23.

вблизи полосы $0-0$ (560 нм), наблюдались полосы: 587 нм и $(0-1, \text{система XX}, \Delta G_{1/2}=831,9 \text{ см}^{-1})$; 628 и 662 нм $(0-0, 0-1 \text{ еще один переход с } \Delta\Omega=+1, \Delta G_{1/2}=833,0 \text{ см}^{-1})$; 696 нм $(0-0, \text{третий переход с } \Delta\Omega=+1)$. Все полосы содержали интенсивную Q -ветвь и более слабые P - и R -ветви. При анализе их вращательной структуры постоянные центробежного искажения фиксировались и принимались равными D_0'' . Значения T_0 (относительно нижней компоненты), B_0 и α_0 (в см^{-1}) для трех указанных состояний с $\Omega=4,5$ — 3500,3; 0,3556; —; 1936,7; 0,3637; 0,0018; 0, 0,361918; 0,0014. Спектр флуоресценции получен также от линии 529 нм Ag^+ лазера [линия $P(34,5)$ полосы $0-0$ системы XXI]. В спектре наблюдались полосы 588, 647, 657, 695 и 756 нм, отнесенные соотв., к переходам из состояния $\Omega'=5,5$ в состояния $\Omega''=4,5$ $(0-0)$, $\Omega''=4,5$ $(0-0)$, $\Omega''=6,5$ $(0-0 \text{ и } 0-1)$ ($T=3736,0$, $\Delta G_{1/2}=830,9$, $B_0=0,362$), $\Omega''=4,5$ $(0-0)$, $T_0=5720,5$, $B_0=0,356$).

В. М. Ковба

PrO

Оттиск 11826 - 1981

12 Д526. Анализ вращательной и сверхтонкой структур полосы 0,0 системы XX молекулы PrO. Rotational and hyperfine analysis of the 0,0 band of PrO XX system. Dulick Michael, Field Robert W., Beau-fils J. Cl. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 87, № 1, 268—277 (англ.)

М.П.

В области 560 нм получен спектр флуоресценции газообразных молекул PrO. Разрешающая способность спектрометра была ограничена доплеровским уширением. Особое внимание уделено анализу вращательной и сверхтонкой структур полосы 0,0, относящейся к системе переходов XX. Получены также спектры возбуждения флуоресценции молекул PrO в полосе XXII 0—0 P (34,5) с возбуждением Ag⁺-лазером. По эксперим. данным определены значения констант $\Delta G(1/2)$, B_0 , d' , d'' , d_j' и d_i'' , характеризующих состояния $\Omega' = 5,5$; $\Omega'' = 4,5$ и $\Omega = 6,5$.
М. Т.

Ф. 1981, 18, N 12.

PrO

Ommuck 11826

1981

M. N.

/ 94: 216888j Rotational and hyperfine analysis of the 0,0 band of the praseodymium oxide (PrO) XX system. Dulick, Michael; Field, Robert W.; Beaufils, J. C. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). J. Mol. Spectrosc. 1981, 87(1), 268-77 (Eng). The PrO XX 0-0 band was recorded at Doppler-limited resolu. by laser excitation spectroscopy with selective fluorescence detection. The rotational and hyperfine structure of this $\Omega' = 5.5 - \Omega'' = 4.5$ band was reanalyzed. In addn., fluorescence spectra obtained through excitation of selected rotational lines in the XX 0-0 band and by the 529-nm Ar⁺ laser line established an energy ordering of 4 low-lying $\Omega = 4.5$ states and 1 $\Omega = 6.5$ state as well as $\Delta G(1/2)$ values for the $\Omega = 6.5$ and the 2 lowest $\Omega = 4.5$ states. Principal consts., in cm⁻¹, are given.

C. A. 1981. 94 N26

PrO

оттиск 11825

1981

Электрон.
спектр,
М.П.

12 Д527. Электронный спектр молекулы PrO. Энергии переходов, вращательный анализ и сверхтонкая структура систем XVII и XXI. The electronic spectrum of PrO. Energy linkages, rotational analysis, and hyperfine structure for systems XVII and XXI. Dulick Michael, Field Robert W., Beaufils J. Cl., Schamps J. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 87, № 1, 278—288 (англ.)

В области 350—700 нм получены спектры возбуждения флуоресценции молекул PrO в четырех полосах: XVII 0—0, XXI 0—0, 0—1 и интеркомбинационной полосе, соответствующей переходам между верхним и нижним состояниями, соответственно систем XVII и XXI. Установлено, что системы XVII и XXI обусловлены переходами $\Omega' = 4,5 \rightarrow \Omega'' = 3,5$ и $\Omega' = 4,5 \rightarrow \Omega'' = 4,5$. Для всех идентифицированных полос определены вращательные константы и постоянные сверхтонкого взаимодействия B_v и d . Кроме этого, обнаружено пять новых низлежащих состояний молекулы PrO.

Ф. 1981, 18, N 12.

PrO

ОТМЕТКА 11825 1981

23 Б171. Электронный спектр PrO. Энергии связи, вращательный анализ и сверхтонкая структура систем XVII и XXI. Dulick Michael, Field Robert W., Beaufils J. Cl., Schamps J. The electronic spectrum of PrO. Energy linages, rotational analysis, and hyperfine structure for systems XVII and XXI. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 87, № 1, 278—288 (англ.)

М.П;

Измерена и проанализирована вращательная и СТС след. четырех полос в спектрах лазерного возбуждения и флуоресценции PrO: 602 нм, система XVII, полоса 0—0; 535 и 560 нм, система XXI, полосы 0—0 и 0—1 соотв.; 610 нм — новая интеркомбинац. система, включающая верхнее состояние системы XVII и нижнее состояние системы XXI, полоса 0—0. Методика эксперимента аналогична ранее использовавшейся (см. след. реферат). Приведены волновые числа линий вращательной и СТ структуры. Значения молекулярных по-

X. 1981, 19, №23.

стоянных T_v , B_v , $D_v (\cdot 10^7)$, d и $d_v (\cdot 10^4)$ PrO (в см^{-1}):
 состояние $\Omega=4,5$, $v=0$ —18882,388, 0,353001, 2,87;
 0,12403; 1,031; состояние $\Omega=4,5$, $v=0$ —16594,075,
 0,353736; 4,29; 0,12977; 1,216; состояние $\Omega=4,5$, $v=$
 $=1$ —1049,035; 0,360719; 3,41; 0,27691; 2,011; состояние
 $\Omega=4,5$, $v=0$ —217,383; 0,362134; 3,38; 0,27744; 7,042;
 состояние $\Omega=3,5$, $v=0$, —0, 0,360948, 3,22, —0,00809,
 —. Из анализа вращательной структуры спектров флу-
 oresценции с различных y' , $v'=0$ уровней верхних со-
 стояний систем XVII и XXI получены данные (T_0 и B_0)
 для еще пяти низколежащих состояний: $\Omega=3,5$ —
 3887,15, 0,35751; $\Omega=3,5$ —2931,66, 0,35712; $\Omega=4,5$ —
 2155,16, 0,36264; $\Omega=5,5$ —2099,16, 0,35879, $\Omega=3,5$ —
 2064,34, 0,35654. Обсуждается конфигурация наблюда-
 емых электронных состояний молекулы. В. М. Ковба

PrO

Ommuck 11825

1981

/ 94: 216889k The electronic spectrum of praseodymium oxide (PrO). Energy linkages, rotational analysis, and hyperfine structure for systems XVII and XXI. Dulick, Michael; Field, Robert W.; Beaufils, J. C.; Schamps, J. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 87(1), 278-88 (Eng). Doppler-limited laser excitation spectra for 4 bands of PrO were recorded: System XVII 0-0, System XXI 0-0 and 0-1, and the 0-0 intercombination between the upper and lower states, resp., of Systems XVII and XXI. First lines in *R* and *P* branches prove that Systems XVII and XXI are, resp., $\Omega' = 4.5 - \Omega'' = 3.5$ and $\Omega' = \Omega'' = 4.5$. Hyperfine components are well resolved for all 4 excitation bands. Rotational and hyperfine consts. are detd. by least-squares fits data from all 4 bands together. In addn., fluorescence spectra, recorded from various $J', v' = 0$ levels of the upper states fo Systems XVII and XXI, reveal 5 new low-lying states. Principal consts. 9 Ω -states are given.

M.H.

C.A. 1981. 94 N26

PrO

[Ummuck 14948]

1982

Field R.W.,

Закмпорт.
смык -
мypo

Ber. Bunsenges. Phys.
Chem., 1982, 86, n 9,
771 - 779.



PrO

1982

/ 7 Д429. Вращательный анализ некоторых электронных переходов PrO. Rotational analysis of some electronic transitions in the spectrum of PrO. Shenyavskaya E. A., Kalendin L. A. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 1, 22—34 (англ.)

М.П. Термический спектр испускания молекул PrO сфотографирован при разрешении $\sim 300\,000$. Выполнен вращательный анализ 13 полос принадлежащих 10 различным электронным переходам. Определены спектроскопич. постоянные ν_0 , B' , D' , B'' , D'' для всех 13 полос.
В. С. Иванов

№ 1982, 18, № 4.

PrO

1982

13 Б120. Вращательный анализ некоторых электронных переходов в спектре PrO. Shen y a v s k a y a E. A., K a l e d i n L. A. Rotational analysis of some electronic transitions in the spectrum of PrO. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 1, 22—34 (англ.)

Проведен вращательный анализ 13 эмиссионных полос PrO в области 5000—10 000 Å, принадлежащих 10 различным системам электронных переходов. Исследованные полосы разделены на три группы: первая группа: 5352, 5597, 5363, 7320, 6924 и 10 405 Å; вторая группа: 6019, 8386, 9578 Å; третья группа: 5367, 5612, 7376, 7708 Å. В каждой группе комбинац. разности $\Delta_2 F''$ для каждого J совпадают в пределах точности измерений, как это имеет место для полос с общим нижним состоянием.

В. М. Михайлов

М.П.

х. 1982, 19, N 13.

PrO

1982

96: 60285p Rotational analysis of some electronic transitions in the spectrum of praseodymium monoxide. Shenyavskaya, E. A.; Kaledin, L. A. (Dep. Chem. Thermodyn., Inst. High Temp., Moscow, USSR). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 91(1), 22-34 (Eng). Rotational anal. of 13 emission bands of PrO belonging to 10 different systems was carried out. The derived consts. are given.

Франц
Ананыч
полос в
7л-спектре

С.А. 1982, 96, №8

P_4O

(у Кумаркова)

1983

Душин Р.Б., Церба Л.А.,

Прочесываемые низковольтные
электронные уровни молекул P_4O .

низковольтная.

Электронные
уровни

Тезисы докл. XIX Всесоюзного
Съезда по электро-
химии, ● Томск, 1983

PrO

[Om. 19228]

1984

Goodfriend P. L.,
(We, ozerka) Spectrochim. acta,
1984, A40, N.3, 283 -
285



PrO

Om. 21972

1985

4 Л225. Электронная структура PrO: сводка результатов анализа. Electronic structure of PrO: an analysis summary. Dulick M., Field R. W. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 113, № 1, 105—141 (англ.)

Исследованы 0—0-полосы 9 электронных переходов (системы X, XI и XVI—XXII) в области 500—800 нм. В спектрах лазерного возбуждения флуоресценции, полученных с высокой точностью ($\pm 0,005 \text{ см}^{-1}$), выполнено Ω -отнесение верхних и нижних состояний. Исследования разрешенной флуоресценции выявили 22 новых электронных перехода PrO, расположенных в той же области спектра. Приведена энергетич. диаграмма уровней для 31 электронного перехода между 22 состояниями. А. С. Иванов

Li. N., Li.)

ср. 1986, 18, 14

PrO

отм. 41972

1985

4 Б1187. Электронная структура PrO . Итоговый анализ. Electronic structure of PrO : an analysis summary. Dulick M., Field R. W. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 113, № 1, 105—141 (англ.)

Исследованы полосы $0-0$ (иногда $0-1$, $1-1$) 9 электронных переходов молекулы PrO в спектрах возбуждения и 22 переходов в спектрах флуоресценции (обл. 500—800 нм). Для возбуждения использован узкополосный ($\Delta\nu \sim 1$ МГц) перестраиваемый одномодовый лазер на красителях. Отнесение переходов по Ω' и Ω'' проводилось по первым линиям в P - и R -ветвях вращат. структуры. Проанализированы полученные данные по колебат., вращат. и СТС спектров, результаты выполненных ранее исследований PrO . Приведены значения T_0 и $\Delta G_{1/2}$ для различных переходов и состояний. В предположении, что конфигурация основного электронного состояния $\dots 4f^2\sigma bs$ и электронная структура молекулы может быть описана в рамках ионной модели $\text{Pr}^{2+}\text{O}^{2-}$ дана итоговая диаграмма состояний PrO , включающая 22 уровня и 31 переход между ними. Обсуждены СТ и электронно-вращат. взаимодействия в молекуле.

В. М. Ковба

м.п., 2;

X. 1986, 19, N 4

PrO

DM. 21972

1985

103: 131622x Electronic structure of praseodymium monoxide (PrO): an analysis summary. Dulick, M.; Field, R. W. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 113(1), 105-41 (Eng). The (0, 0) bands of 9 prominent electronic transitions, Systems X, XI, and XVI through XXII, in the wavelength region 500-800 nm were studied. High-precision ($\pm 0.005 \text{ cm}^{-1}$), Doppler-limited, selectively detected dye laser fluorescence excitation spectra for Systems XVI through XXII were recorded and analyzed. Definitive Ω assignments for the upper and lower states of these transitions were established from identified 1st lines in the P and R branches. Resolved fluorescence studies revealed 22 addnl. electronic transitions in the same wavelength region, many of which provide energy linkages between the upper or lower states of previously obsd. transitions. The comprehensive energy level diagram assembled from 31 electronic transition linkages comprises a total of 22 upper and lower electronic levels. Ω Assignments and relative energies for the electronic states of the transitions studied (including Systems XIV and IX identified in fluorescence and the proposed assignment for System VI) are given. The relative energies are with respect to the lower state of System XVII, assigned here as the ground electronic state.

А. М. Мухоморова

М. Н.

Г. А. Мухоморова

А. М. Мухоморова

C. A. 1985, 103, N 16.

PrD

10m. 32512}

1989

Field R. W., Baldwin D. P.,
et al.

Spectrochimica Acta Col-
den Jubilee Symposium

Si June 27-28, 1989.

Spectroscopy Beyond
Molecular Constants.

PrO

OM 35156

1990

сверхтонкая
структура

113: 240795h Hyperfine structure in the two lowest electronic states of praseodymium monoxide molecular-beam laser-rf double resonance. Childs, W. J.; Azuma, Y.; Goodman, G. L. (Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 144(1), 70-96 (Eng). The hyperfine structure (hfs) splittings in the electronic ground state ($\Omega = 3.5$, $\nu = 0$) and the first excited electronic level (energy = 220 cm^{-1} , $\Omega = 4.5$, $\nu = 0$) of ^{141}PrO were measured over a broad range of J -values to a precision of about ± 3 kHz. No perturbations are obsd. The levels are represented as states of $\text{Pr(III)} 4f^2 6s$ in an axial elec. field, and the hyperfine structure resulting from the combined hfs and rotational Hamiltonians is worked out. The contribution due to the interaction between the two states of different Ω is important. A single least-squares fit is made of the resulting theor. expressions to the 166 radiofrequency (rf) measurements in the two states. Efforts are made to identify the contributions analogous to the conventional terms involving b , c , and eqQ . The perturbations in the optical spectra (of systems XVII and of the band at 6100 Å) are in the common upper level (as previously reported), as is the Λ -doubling. The hyperfine structure of the upper state is detd. to a precision of a few MHz.

с.А. 1990, 113, 226

PrO

М.А.

Om 35-156

X.1991, N 11

1990

11 B1201. Сверхтонкая структура в двух наименее-
ших электронных состояниях PrO при помощи лазер-
ного-радиочастотного двойного резонанса с молекуляр-
ным пучком. Hyperfine structure in the two lowest
electronic states of PrO by molecular-beam laser-rf
double resonance. / Childs W. J., Azuma Y., Good-
man G. L. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 144, № 1.—
С. 70—96.— Англ.

Методами индуцир. лазерным излучением ФЛ и ла-
зерного-РЧ двойного резонанса с использованием мо-
лек. пучка измерена с точностью 3 кГц сверхтонкая
структура электронных переходов $(\Omega''=3,5, v=0) \rightarrow$
 $\rightarrow (E=16\,594\text{ см}^{-1}, \Omega'=4,5, v=0)$ и $(E=220\text{ см}^{-1}$
 $\Omega''=4,5, v=0) \rightarrow (E=16\,594\text{ см}^{-1}, \Omega'=4,5, v=0)$
¹⁴¹PrO. Анализ спектров выполнен с учетом эффектов
звращения, квадрупольного вз-вия и спин-орбитального
вз-вия. Значит. вклад дает вз-вие между двумя элект-
ронными состояниями с различными Ω . На основе по-
лученных спектроскопич. данных вычислена СТС в
основном электронном состоянии с эксперим. точно-
стью, в первом возбужденном электронном состоянии
с точностью около 0,5 МГц и в верхнем электронном
состоянии с точностью в несколько МГц. С. Н. Мурзин

PrO

1991

114: 255878g Intermediate neglect of differential overlap spectroscopic studies of lanthanide complexes: diatomic lanthanide oxides praseodymium monoxide and thulium monoxide. Kotzian, M.; Roesch, N. (Tech. Univ. Muenchen, 8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 147(2), 346-58 (Eng). The low-lying states of PrO and TmO arising from the at.-like mol. ground states $4f^6s$ and $4f^{12}6s$, resp., are calcd. employing a spectroscopic INDO (INDO) MO procedure augmented by a double-group CI (CI) technique which includes spin-orbit interactions. The mol. states closely follow the coupling pattern of the at. states, as is revealed in a display according to the approx. quantum no. J , characterizing the total angular momentum no. of the lanthanide contribution to the leading determinant. Overall agreement with expt. and recent ligand field calcs. is very good, esp. for the manifold of the lowest-lying multiplet component of PrO ($J = 4$). Both theor. procedures reproduce the exptl. Ω value for the ground state, 3.5. However, the INDO approach predicts a different Ω for the ground state of TmO than do ligand field calcs.

Нижележащий
состояние,
расчет

④ TmO

C.A. 1991, 114, N 26