

La O

LaO

Ferrous W.

1929

Proc. Phys. Soc. London,
41, 520.

The band spectrum of
lanthanum monoxide.

LaO

Jenkins F. A.,
Harvey A.

1931

Phys. Rev., 39, 922.

Emission and absorption
spectra of LaO.

1931.

Lao

Johnson L.W.

Johnson R.C.

Proc. Roy. Soc. London A,

1931, 133, 287-19.

31.90

кажпирегану

LaO

⁽³³⁸⁹⁰⁾ Meggers W.F., Wheeler J.A. 1931

J. Res. Natl. Bur. Std., 6, 239

OM 33890

The band spectra of scandium, yttrium, and lanthanum monoxides.

LaO

Piccardi G.

1933

Gazz. chim. Ital. , 63, 127.

The band spectra of the
monoxides ScO , Y_2O , and LaO .

LaO

Piccardi G.,

1939.

Spectrochim. Acta, 1939,
1, 249-60 -

Анализ мезендр

LaO

1948

Keenan P. C.,

Astrophys. J., 1948, 107, 420-1

48.69

Кривоус. 6
сентября 31 год

1956

Y₂O₃

La₂O₃

Ce₂O₃

Ночка М.

Спектроскопическая работа, 1956, 8, 287

Термометрич. опред. энергии диссоциации Y₂O₃, La₂O₃ и Ce₂O₃

кр. сообщ.

значения D_0° не приведены

1956

LaO

W. A. Chupka, M. Y. Inghram, R. F. Porter,
J. Chem. Phys. 1956, 24, 792.



LaD

Tawde N.R., Chandrabreya P.V. (1956)

J. Karnatak Univ, 1, 74-9.

Intensity aspects as determinant
of $(z_1 - z_2)$ difference in the B
and X levels of LaD.

CA 52

6923d

VIII 1283

1956

ZaO (ΔH_f° , ΔG°); Za^+ , ZaO^+ (A.P.)
Za (ΔG° , ΔH_v)

Chupka W.A., Inghram M.G.,
Porter R.F.,

J. Chem. Phys., 1956, 24, 792-796

М. Б. 10

ГОТЪ С. И.

Прех, 1957, №3. 7167

Lad

Bd-5351-III

1957

Alec H. Scherr.

(70)

Ann. Rev. Phys. Chem.

1957, 8, 439.

• call Bd

LaO

Gatterer A., Junkes J., 1957

Salpeter E. W.

ed. Spectra of Metallic
Oxides (1957) Specola Vaticana

LaO

Quinn 3174

1957

G. Herzberg.

(Do)

Mem. Soc. Roy. Sci., Liege

1957, 18, 397-418.

Lao

Lagerqvist A., Hultdt L. 1957²

Ark. Fys., 12, 491 (1957)

ZrO_2 (Y₂O₃),
Y₂O₃ и Ta₂O₅

Walsh P.N., White D.

1958

Ohio St. Univ. Note No 2.

Описание легких генеро. Табл II. Указания
Zr₂O₃ и Y₂O₃. Индекс глицеролиз
ZrO, YO и TaO

NSA, 1958
12, 9737

Указания на указание Zr₂O₃ и Y₂O₃
с характеристиками и таблица
refractories при T = 2000 - 2450 и 2000-2700
of легкого круга. При указании
книга из характеристик глицеролиз

содержание на MO и O_2 . $\phi_0(\text{ZrO}) = 8,02 \pm 0,17 \text{ з.б.}$

$\phi_0(\text{Y}_2\text{O}_3) = 7,25 \pm 0,3 \text{ з.б.}$ При нагревании Zr_2O_3 из тав-
тешерок сразу выделяется ZrO и TaO , при нагревании
 Y_2O_3 - TaO , Y_2O_3 и Y_2O . После определения состава
этого соединения найден $\phi_0(\text{TaO}) = 9,34 \pm 0,06 \text{ з.б.}$

Описан метод определения состава соединений
и фазовых соотношений конденсатов при изменении
в кинетическом режиме начальных условий.

LaO

18Б52. Изучение электронных спектров двухатомных окислов. I. Спектр LaO. Hautecler S., Rosen B. Contributions à l'étude des spectres électroniques des oxydes diatomiques. I. Spectre de LaO. «Bull. cl. sci. Acad. roy. Belg.», 1959, 45, № 8, 790—803 (франц.).— Исследованы спектры испускания LaO в видимой и ближней УФ-областях. Источником возбуждения служило «пламя углерода» (РЖХим, 1955, № 12, 23052), образующееся при нагревании на воздухе графита до температуры $\sim 300^\circ$. Графит покрывался слоем соли последующего в-ва. Получено более 350 полос, отнесенных к 8 системам. Проведен анализ колебательной структуры систем. В результате уточнены и дополнены данные о четырех известных ранее системах $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma$, $B^2\Sigma \rightarrow X^2\Sigma$, $C^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma$, $D \rightarrow X^2\Sigma$. Высказано предположение о возможной интерпретации новых обнаруженных систем. Возможно, что нижнее состояние некоторых из них лежит примерно на 1 эв выше состояния $X^2\Sigma$.
Г. Неуймин

1959

5557-111-66

РПС Киминь
1961. 18Б52

LaO

Лавин
чипер

спектр

1В107. Изучение электронных спектров двухатомных оксидов. I. Спектр LaO. Hautecler S., Rosen B. Contributions à l'étude des spectres électroniques des oxydes diatomiques. I. Spectre de LaO, «Bull. cl. sci. Acad. roy. Belg.», 1959, 45, № 8, 790—803 (франц.).— Исследованы спектры испускания LaO в видимой и близкой УФ-областях. Источником возбуждения служило «пламя углерода», образующееся при нагревании на воздухе графита до т-ры $\sim 3000^\circ\text{C}$. Графит покрывался слоем соли исследуемого в-ва. Получено более 350 полос, классифицированных на 8 систем. Проведен анализ колебательной структуры систем. В результате уточнены и дополнены данные о четырех известных ранее системах: $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma$, $B^2\Sigma \rightarrow X^2\Sigma$, $C^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma$, $D \rightarrow X^2\Sigma$. Высказано предположение о возможной интерпретации новых обнаруженных систем. Возможно, что нижний уровень некоторых из них лежит примерно на 1 эв выше норм. уровня молекулы LaO $X^2\Sigma$. Библ. 14 назв. Г. Неуймин

1959

3551 - III - 69

ор-1961-1

A-X	$\left. \begin{array}{l} 7910.5 \\ 7877.2 \end{array} \right\}$	we	we"
		756.5	811.5
	$\left. \begin{array}{l} 7403.5 \\ 7379.8 \end{array} \right\}$	754.2	" "

B-X	$\left. \begin{array}{l} 5602.5 \\ 5600.0 \end{array} \right\}$	732.9	"
-----	---	-------	---

C-X	$\left\{ \begin{array}{l} 4418.2 \\ 4372.0 \end{array} \right.$	782.7	"
		788.2	"

D-X	3604.4	~ 782	"
-----	--------	-------	---


E - ?	$\left. \begin{array}{l} 6607.7 \\ 6605.1 \end{array} \right\}$?	?
-------	---	---	---

F - X	$\left. \begin{array}{l} 3566.1 \\ 3565.8 \end{array} \right\}$	~ 850	811.6
-------	---	-------	-------

y - ?	$\left. \begin{array}{l} 6824.6 \\ 6821.5 \end{array} \right\}$	~ 789	~ 762
-------	---	-------	-------

H - ?	3709.7	?	?
-------	--------	---	---

переход | пороки 0-0!



LaO
4644

Walsh P.N., Goldstein H.W.,
White D. |


1960

Do

Y. Amer. Ceram. Soc.,
1960, 43, 229
p.

Met-129

Do (LaO)

VIII 2621

1961

$\text{La}_2\text{O}_3, \text{Nd}_2\text{O}_3$ (p, $\Delta H_v, \Delta H_f$); LaO, NdO (D,
 CeO, PrO ($\Delta, \Delta H_f$); $\text{Nd}, \text{Pr}, \text{Gd}, \text{Tb}$ (ΔH_v);
 $\text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Lu}$ (ΔH_s).

Goldstein H.W., White D.,

J. Phys. Chem., 1961, 65, 1400-1404

И. Б

ссылка ср.к.

Lao

2437

1961
Goldstein H.W., Walsh R.W.,
White D.

Do

J. Phys. Chem., 1961, 65, 1400
p.

-123
~~Aug-122~~

Do (Lao)

1961

LaO
NdO
Do
||

BP-2621-VIII

Rare earths. I. Vaporization of La_2O_3 and Nd_2O_3 : dissociation energies of gaseous LaO and NdO. Harold W. Goldstein, Patrick N. Walsh, and David White (Ohio State Univ., Columbus). *J. Phys. Chem.* 65, 1400-4(1961).—A combination of Knudsen effusion and mass spectrometric techniques was used. La_2O_3 and Nd_2O_3 vaporize almost stoichiometrically to the monoxide and O. The heats of formation, ΔH_0° , in kcal./mole, and dissochn. energies, D_0° , in e.v. are: LaO -29.8 ± 4 , 8.08 ± 0.2 ; NdO -30.0 ± 6 , 7.18 ± 0.3 , resp. II. A mass spectrometric determination of the heats of sublimation or vaporization of neodymium, praseodymium, gadolinium, terbium, dysprosium, holmium, erbium, and lutetium. David White, Patrick N. Walsh, Harold W. Goldstein, and David F. Dever. *Ibid.* 1404-9.—A time-of-flight mass spectrometer was adapted for thermodynamic investigations at elevated temps. The app. is described in detail. The heats of sublimation (or vaporization) of several rare earth metals were detd. by the mass-spectrometric method, from the variation with temp. of the intensity of an at. beam effusing from a Knudsen cell, in the range 1253 to 2044°K. III. A mass-spectrometric investigation of the isomolecular oxygen-exchange reactions of lanthanum, cerium, praseodymium, and neodymium with their monoxides. Patrick N. Walsh, David F. Dever, and David

C.A. 1962.56.2
1006cdef

Call
1405.

White. *Ibid.* 1410-13.—The equil. consts. for the reactions $\text{Ce}(g) + \text{LaO}(g) \rightleftharpoons \text{La}(g) + \text{CeO}(g)$ (1); $\text{Pr}(g) + \text{LaO}(g) \rightleftharpoons \text{La}(g) + \text{PrO}(g)$ (2); and $\text{Nd}(g) + \text{PrO}(g) \rightleftharpoons \text{Pr}(g) + \text{NdO}(g)$ (3), and their temp. dependence were detd. with a time-of-flight mass spectrometer. The heats of the 3 reactions in kcal./mole calcd. from the results are: ΔH_1 (1870°K.) = 1.05 ± 0.20 , ΔH_2 (1913°K.) = 15.8 ± 0.4 , ΔH_3 (1910°K.) = 6.9 ± 0.6 . These heats of reaction give directly the difference in dissocn. energies, at the indicated temps., of the 2 gaseous monoxides in each of the reactions. The dissocn. energies at abs. zero D_0^0 in e.v. calcd. from these results and appropriate thermal functions are $D_0^0(\text{CeO}) = 8.03 \pm 0.2$, $D_0^0(\text{PrO}) = 7.40 \pm 0.3$, $D_0^0(\text{NdO}) = 7.06 \pm 0.2$. The electronic contributions to the entropy of the gaseous monoxides at elevated temps. are discussed in terms of the measured entropy changes in the reactions. P. M. B.

a.
Kr

Lal

Jawde N. R.,

1961

Chandratreya P.V.

Current Science, India,
30, 137.

Experimental study of transition probabilities in ast-radical radicals: Lal (B \rightarrow X) system.

ZaO
4643

Walsh P.N., Dever D.F. 1961
White D.

Do

J. Phys. Chem., 1961,
65, 1410
p.

May-128

Do (CeO)
(LaO)

Lao

B9-VIII-1032

1962

20B121. Анализ вращательной структуры системы полос окиси лантана. Akerlind Lars. Die Rotationsanalyse der Bandensysteme des Lantanoxyds. «Naturwissenschaften», 1962, 49, № 1, 7 (нем.).—Произведен анализ вращательной структуры двух систем полос окиси лантана. Анализ показал, что одна из этих систем, лежащая в ближней ИК-области, принадлежит переходу ${}^2\Pi - {}^4\Sigma - (A^2\Pi - X^4\Sigma)$. Другая система, лежащая в желто-зеленой области, принадлежит переходу ${}^2\Sigma - {}^4\Sigma (B^2\Sigma - X^4\Sigma)$. В обеих системах произведен анализ только 0,0-полос. Терм $A^2\Pi$ дает дублетное расщепление величиной 800 см^{-1} . Состояние $B^2\Sigma$ обнаруживает весьма большое спиновое расщепление. Вычислены следующие вращательные постоянные: $X^4\Sigma$ $B_0'' = 0,3520 \text{ см}^{-1}$, $D_0'' = 0,25 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$, $A^2\Pi^{3/2}$ $B_0' = 0,3468 \text{ см}^{-1}$, $D_0' = 0,34 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$, $A^2\Pi^{1/2}$ $B_0' = 0,3462 \text{ см}^{-1}$, $D_0' = 0,32 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$, $B^2\Sigma$ $B_0' = 0,3406 \text{ см}^{-1}$, $D_0' = 0,25 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$. И. Милевская

x. 1962. 20

Lad

89-VIII-1032

1962

Rotational analysis of the band systems of lanthanum oxide. Lars Akerlind (Univ. Stockholm). *Naturwissenschaften* 49, 7(1962). The 0,0 bands of 2 systems were studied. The infrared system represents a transition $A^2\Pi - X^4\Sigma$, the yellow-green system a transition $B^2\Sigma - X^4\Sigma$. The $A^2\Pi$ term has a doublet splitting of about 800 cm^{-1} and the $B^2\Sigma$ state shows significant spin splitting. The following consts. were calcd.: $X^4\Sigma$, $B_0'' = 0.3520$, $D_0'' = 0.25 \times 10^{-6}$; $A^2\Pi_{3/2}$, $B_0' = 0.3468$, $D_0' = 0.34 \times 10^{-6}$; $A^2\Pi_{1/2}$, $B_0' = 0.3462$, $D_0' = 0.32 \times 10^{-6}$; $B^2\Sigma$, $B_0' = 0.3406 \text{ cm}^{-1}$, $D_0' = 0.25 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$

Karl-Dieter Kuhn

C.A. 1962. 57. 2

1754e

LaO

39-VIII-1032

1962

12 B171. Вращательный анализ системы полос окиси лантана. Akerlind Lars Die Rotationsanalyse der Bandensystemedes Lantanoxyds. «Naturwissenschaften». 1962, 49, № 1, 7 (нем.)

Дан вращательный анализ красной $A^2\pi - X^1\Sigma$ и желто-зеленой $B^2\Sigma - X^1\Sigma$ -систем полосатого спектра окиси лантана и определены молекулярные постоянные (в см^{-1}) для состояния $X^1\Sigma - B''_0 = 0,3520$, $D''_0 = 0,25 \cdot 10^{-6}$; для $A^2\pi_{3/2}$, $B'_0 = 0,3468$, $D'_0 = 0,34 \cdot 10^{-6}$; для $A^2\pi_{1/2}$ $B'_0 = 0,3462$, $D'_0 = 0,32 \cdot 10^{-6}$; для $B^2\Sigma$ $B'_0 = 0,3406$, $D'_0 = 0,25 \cdot 10^{-6}$. О. Грин

ф. 1962. 12 В

Lad. ^{omnucen n 22} & name Stockholm. Univ ¹⁹⁶²

Akerlind L.

Inaugural dissertation
Uppsala, 1962

Investigations in the band
-spectra of the diatomic
molecules ● SeO, VO, LaO.

116
omnucen 917

✓
LaO

1433 ROTATIONAL ANALYSIS OF THE RED AND GREEN-YELLOW SYSTEMS OF LANTHANUM OXIDE.

Lars Åkerlind (Univ. of Stockholm). Arkiv Fysik, 22: 65-93(1962). (In English)

Rotational analyses of the red band system (7000 to 8500 Å) and the green-yellow band system (5400 to 5900 Å) of LaO are carried out. In the red system, consisting of a ${}^2\Pi - {}^4\Sigma$ ($A {}^2\Pi - X {}^4\Sigma$) transition, the 0,0 bands, the 1,0 band of ${}^2\Pi_{3/2} - {}^4\Sigma$, and the 0,1 of ${}^2\Pi_{3/2} - {}^4\Sigma$ are analyzed. The ${}^2\Pi$ -term is regular. The green-yellow system is a ${}^2\Sigma - {}^4\Sigma$ transition, designated B → X. The following bands are examined: 0,0, 1,0, and 0,1. The spin-splitting of the ${}^2\Sigma$ -term is considerable. A comparison between the molecules ScO, YO, and LaO is made, and correlations between the molecular and atomic terms of the three molecules are suggested. (auth)

139-1111-1134

Chem
A²Π-X

1962

Chemical 11511

NSA. 1965. 17.2

LaO

01111111 11511

1962

1501-1111-1031

Rotational analysis of the red and green-yellow systems of lanthanum oxide. Lars Akerlind (Univ. Stockholm). *Arkiv Fysik* 22, 65-93(1962)(in English); cf. *CA* 57, 4190g. The 0,0, 0,1, and 1,0 bands in the red and the green-yellow regions of the LaO spectrum are studied for rotational structure. Spectral measurements and data from M. I. T. Wave-Length Tables were fed to a computer to obtain the numerous wave nos. tabulated. The red system has 2 parts. Each band contains 2 marked heads. Subbands form 4 strong branches and 2 weaker ones. The rotational structure of the LaO red system is analogous to that of the orange bands of ScO. The red LaO system is a $^3\Pi(a)-^4\Sigma$ transition. The $^3\Pi$ term fits Hund's case *a*. In the green-yellow system, every band has 2 double heads. This structure fits a $^2\Sigma-^4\Sigma$ transition formula and is similar to the blue-green bands of ScO. A comparison of the spectra of LaO, ScO, and YO suggests that the lower Σ levels are the ground states of the mols. The $^3\Pi$ states in all 3 belong to Hund's case *a*. The lower Σ states are similar in LaO and ScO. The structure here is more simple in YO. Slight perturbation occurs in the $^3\Pi_{1/2}$ states of ScO and YO. N. B. Gildersleeve

CA-1962-57-9

10662 de

1962

Отмиса 14577

LaO

смесь

8 Д130. Вращательный анализ красной и зелено-желтой систем полос LaO. A. Berling Lars. Rotational analysis of the red and green-yellow systems of lanthanum oxide. «Arkiv fys.», 1962, 22, № 1, 65—93 (англ.)

Произведен вращательный анализ красной (7000—8000 Å) и зелено-желтой (5400—5900 Å) систем полос LaO. В красной системе, соответствующей переходу $A^2\Pi-X^4\Sigma$, анализированы полосы 0—0, 1—0 $^2\Pi_{3/2}-^4\Sigma$ -перехода и полоса 0—1 $^2\Pi_{1/2}-^4\Sigma$ -перехода. $^2\Pi$ -терм соответствует случаю *a* по Гунду. Зелено-желтая полоса относится к переходу $^2\Sigma-^4\Sigma$, обозначенному *B-X*. В этой системе анализированы полосы 0—0, 1—0 и 0—1. Наблюдено значительное спиновое расщепление термина $^2\Sigma$. Приведены молекулярные константы.

14577-1034
89-1111-68

Ф. 1963. 80

LaO

Спец

89-VIII-1034/89

1514
опт. спец. 11571

X. 1964. 2

1962

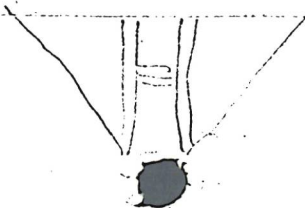
2 Б53. Анализ вращательной структуры красной и зелено-желтой систем полос окиси лантана. Åkerlind Lars. Rotational analysis of the red and green-yellow systems of lanthanum oxide. «Arkiv fys.», 1962, 22, № 1, 65—93 (англ.)

Проведен анализ вращательной структуры двух систем полос LaO: красной (7000—8500 Å) и зелено-желтой (5400—5900 Å). В красной системе, состоящей из переходов ${}^2\Pi-{}^4\Sigma(A^2\Pi-X^4\Sigma)$, рассмотрено четыре полосы: две $0-0, 1-0 ({}^2\Pi_{3/2}-{}^4\Sigma)$ и $0-1 ({}^2\Pi_{1/3}-{}^4\Sigma)$. ${}^2\Pi$ -терм принадлежит к случаю Гунда *a*. Система хорошо согласуется с теоретич. рассмотрением ${}^2\Pi-{}^4\Sigma$ -переходов, за исключением несколько повышенной интенсивности двух ветвей QR_{23} и PP_{22} в ${}^2\Pi_{1/2}-{}^4\Sigma$ -полосе. Зелено-желтая система состоит из переходов ${}^2\Sigma-{}^4\Sigma$ (обозначенных *B-X*). Рассмотрены полосы $0-0, 1-0$ и $0-1$. Терм ${}^2\Sigma$ имеет значительное спиновое

Сил.
Моб.

расщепление. Проведено сравнение систем полос молекул ScO , YO и LaO и приведены в соответствие молекулярные и атомные термы этих молекул. Структура обеих полос у YO проще из-за того, что более низким Σ -состоянием в YO является ${}^2\Sigma$, а в ScO и LaO — ${}^4\Sigma$. ${}^2\pi$ -состояние всех трех молекул относится к серии Гунда a с постоянной расщепления A , которая определяет величину мультиплетного расщепления.

И. Милевская



VIII - 1187 - BT

1965
108

26321) DETERMINATION OF THE GROUND ELECTRONIC STATE OF LaO GAS. Leo Brewer and R. M.

Walsh (Univ. of California, Berkeley). J. Chem. Phys., 42: 4055-7 (June 1, 1965). (UCRL-11960)

A method of establishing the ground electronic state by observation of absorption in a molecular beam at a sufficient distance from the source was applied to a molecular beam of LaO, which was generated by heating a mixture of La metal and La₂O₃ in a tantalum Knudsen cell, with a rectangular orifice 1-mm wide and 10-mm long. Results established the level of LaO designated as X⁴Σ as the ground state. (M.C.G.)

OCM. conf.

NSA. 1965. 19.14

LaO

VIII - 1987 - ВР

1965

108

1 Д111. Определение основного электронного состояния газообразного LaO. Brewer Leo, Walsh R. M. Determination of the ground electronic state of LaO gas. «J. Chem. Phys.», 1965, 42, № 11, 4055 (англ.)

Для определения основного электронного состояния (ЭС) газообразного LaO, существующего в виде газа только при высоких Т-рах, использовалась флуоресценция молекулярного пучка LaO, возбуждаемая светом от источника с накаливаемой нитью. Флуоресценция измерялась в направлении, перпендикулярном молекулярному пучку и возбуждающему свету. Установлено, что основным ЭС является $X^4\Sigma$. Метод пригоден и для других газов со временем флуоресценции меньше 10^{-3} — 10^{-4} сек.

А. Додонов

тип

основного

электр.

свет

ф. 1966.

1D

LaO

VII - 1187 - BT

10.8 | 1965

Determination of the ground electronic state of LaO gas. Leo Brewer and R. M. Walsh (Univ. of California, Berkeley). *J. Chem. Phys.* 42(11), 4055(1965)(Eng). The method of measuring the ground electronic state by observation of absorption in a mol. beam at a sufficient distance from the source was applied to a mol. beam of LaO which was generated by heating a mixt. of La metal and La_2O_3 in a Ta Knudsen cell. The $X^1\Sigma$ level of LaO is designated as the ground state. This method should be useful for other high-temp. mols. for which low-lying states have lifetimes $< 10^{-3} - 10^{-4}$ sec. D. V. Anders

C.A. 1965. 63.6

63287

Наблюдения в зимнем году 1900-1901.
Экземпляр в коллекции музея города О-О.
1-1 экземпляр $X^4 \Sigma - 13^2 \Sigma$ (по Акеперену), при на-
блюдении в году много воды в горах.
В-м наблюдение, в $X^4 \Sigma$ - осн. часть воды,
на основании, в горах осн. часть воды
500 и 40 - гора осн. часть

VIII - 4955

1965

LiD, LiD (маг. уст., тун сенсори
уст.)

Berg R.A., Wharton L., Klempner W,
Büchler A., Stauffer J.L.,

J. Chem. Phys., 1965, 43, 2416-2421

10

лето опр.

51025.3768

Ph, Ch

ScO, YO, LaO

(тип основн. сост.)

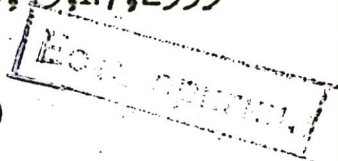
VIII 1238
1965

Kasai Paul H., Weltner William, Jr.

Ground states and hyperfine-structure separations of ScO, YO, and LaO from ESR spectra at 4°K. "J.Chem.Phys.", 1965, 43, N7, 2553

(англ.)

Ю



939

ВИНИТИ

36345 (UCRL-11927) MOLECULAR-BEAM STUDIES
OF LANTHANUM MONOXIDE (thesis). Walsh, Robert
Michael. (Lawrence Radiation Lab., Univ. of California,
Berkeley). Apr. 1965. Contract W-7405-eng-48. 42p.
Dep.(mn); \$2.00(cy), 1(mn) CFSTI.

A new method was devised to establish the ground state of a high-temperature molecule by examination of the fluorescent spectrum of a molecular beam. An apparatus to form a molecular beam was constructed and a beam of lanthanum monoxide generated. The new method was successfully applied to establish the ground state as that designated as $X^4\Sigma$ in earlier spectral studies. The suitability of the LaO beam for use in the determination of the radiative lifetime by means of the phase-delay technique is discussed, together with a consideration of the light sources that might be used for such a measurement. The lifetime of the $B^2\Sigma$ state of LaO was estimated to be on the order of 10^{-7} sec. The known electronic spectra of LaO, ScO, and YO are discussed and an extension of the molecular-beam fluorescence technique is proposed to settle a problem of the location of an excited state. (auth)

LaO
MON. Myren
NSA-1965-19.19

1985

Commux 559 1965

Molecular-beam studies of lanthanum monoxide. Robert Michael Walsh (Univ. of California, Berkeley). *U.S. At. Energy Comm. UCRL-11927*, 39 pp.(1965)(Eng). The ground electronic states of high-temp. mols. was examd. by the fluorescent spectrum of a mol. beam. An app. was constructed to generate a mol.-beam of LaO. The ground state was designated as $X^4\Sigma$. The lifetime of the $B^2\Sigma$ state was estd. to be $\approx 10^{-7}$ sec. Known electronic spectra of the mol.-beam fluorescence technique is proposed.

George E. Ellis

Молекуляр
спектр
LaO

C.A. 1966.64.5
5961e

508I2.2902

Ch, Ph

ScO, YO, LaO, Sc₂O, Y₂O, Y₂O₂,
La₂O, La₂O₂ (D₀)VIII 2349
1965

Smoes S., Drowart J., Verhaegen G.
 Mass-spectrometric study of gaseous
 oxides and suboxides of scandium, yttrium,
 and lanthanum. "J. Chem. Phys.", 1965, 43,
 N 2, 732-736

M, 10 (англ.)

"НИИДО СЛОИ"

ВИНИТИ

876

VIII 2503

1965

LaO (мол. оксид.)

Walsh P.M.,

U.S. At. Energy Comm., UCRL-11927

1965, 39pp

Molecular-beam studies of lanthanum monoxide

неб в б-ке

CA, 1966, 64, N 5, 5961e

10

La.O.

1966

Molecular beam studies of lanthanum monoxide. Robert Michael Walsh (Univ. of California, Berkeley). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.), Order No. 65-13,616, 41 pp.; *Dissertation Abstr.* 26(10), 5749(1966)(Eng); cf. CA 64, 5961e.

B. 10

SNDC

C.A. 1966. 65. 3

3165 de

1966

LaO (man ocre. coem.)

Walsh P.M.,

Dissertation Abstr., 1966, 26(10),
5749

Molecular beam studies of lanthanum
monoxide

CA, 1966, 65, N 3, 3165d

10

Yao
1310!

Ames L. L., & Walsh P. N.,¹⁹⁶⁷
White D.

Do

J. Phys. Chem., 1962,

M.p. 2702

my-130

Do (Lao)

M 2545

1967
GeS, ScS, YS, LaS, CeS, S₂O, LaO, YO, CeO, VO (Do)

Coppens P., Smoes S., Drowart J.

Trans. Faraday Soc., 1967, 63(9), 2140-8

Mass spectrometric determination of the dissociation energies of the molecules bes ScS, YS, LaS and CeS

ECTL Q. R.

CA, 1967, 67, N 20, 94544p.

F

J., M.,

LaO

10m. 20877 A-1246/967

Drowart J., Pattoret A., Smoes S.,
Proc. Brit. Ceram. Soc., 1967,
N 8, 67-89.

Do

Mass Spectrometric Studies of
the Vaporization of Refractory
Compounds. ●

Lao

Оммуек 3030

1967

Венг У.В., Туплев Л.В.

сметы
нормы)

Фонд. АН СССР, 1967,

173, № 6, 1325-28

Л.В.В.

ScO, YO, LaO (веш. согодуна $^2\Sigma$) 1967

Walshner W., McLeod D., Kasai P.H.,
J. Chem. Phys., 1967, 46(8), 3172-84.

E.S.R. and optical spectroscopy of
ScO, YO and LaO in neon and argon
matrices; establishment of ~~the~~ ground

10



LaO

Смелюк

ВФ-VIII-13

1968

21 Б108. Изучение молекулярных спектров при помощи фотоэлектрического спектрометра Фабри — Перо с высокой разрешающей силой и лампы с полым катодом. Спектр LaO. *Bacis Roger. Etude à très haute résolution de spectres moléculaires à l'aide d'un spectromètre photoélectrique Fabry--Pérot et d'une lampe à cathode creuse constituée par un alliage; cas de l'oxyde LaO. «C. r. Acad. sci.», 1968, 266, № 16, В 1071—В 1074 (франц.)*

Усовершенствована лампа с полым катодом (на стенке катода напылена смесь 35 La и 65% La₂O₃) для изучения с помощью спектроскопии высокого разрешения тонкой и сверхтонкой структуры молекулярных спектров. Исследован спектр LaO. В. И. П.

х. 1968. 21



спектр. исследования

1948

LaO
(улы)

FeO
MgO
AlO

13
89-1111

6523u High resolution molecular spectra obtained with a Fabry-Perot photoelectric spectrometer and a hollow-cathode tube made up of an alloy; lanthanum oxide. Bacis, Roger (Univ. Lyon, Villeurbanne, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. A, B* 1968, 266B(16), 1071-4 (Fr). The mol. spectrum of LaO was recorded by the title method. By coating the walls of the hollow-cathode with a La-La₂O₃ alloy, the intensity of the radiation increased by 10 times as compared to that obtained from a deposit of La₂O₃. At the same time, the stability of the spectrum improved. The (0.0) band of the ²Σ-²Σ system, which extends over 80 cm.⁻¹, showed lines due to P₁, P₂, R₁, and R₂ branches. The alloy method is also appropriate for detg. the mol. spectra of FeO, MgO, AlO, etc.

BGJF

+ 1 инд.

C. A. 1948. 69. 2

Zao
1924

Coppens P., Smoes S.,
Drowart J., 1968

Do
lepp

Trans. Faraday Soc.,
1968, 64, p. 630

Met-153

Do (Lao)

LaO

Гісторичний
музей

Antic y, Caro P.

1969

C. u. Acad. sci.,

1969, C268, ~14, 1281.

(C. u. La) III

LaO (u.n)

8

VIII 2068

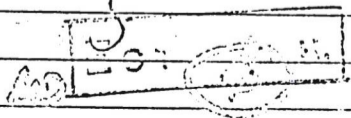
1969

Carotte P., Blondeau F.M.,

C.-R. Acad. Sci, 1969, 268, 226, B1743-B1745
(2p)

Analyse de la rotation du système
indigo du spectre d'émission de
la molécule LaO

Bukura, 1969, 235295



B97-2068-VIII

1969

LaO

(75909c) Analysis of the rotation of the indigo system in the emission spectrum of the lanthanum(II) oxide molecule. Carrette, Pierre; Blondeau, Jean M. (Lab. Spectrosc. Opt., Fac. Sci. Lille, Annapes, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1969, 268 (26), 1743-5 (Fr). The 0-0 and 1-1 band heads of the $^3\Pi_{3/2} \rightarrow ^4\Sigma$ transition, and the 0-0, 1-1, 2-2, 3-3, 4-4, and 5-5 of the $^3\Pi_{1/2} \rightarrow ^4\Sigma$ transition of the LaO mol. are observed. The rotation consts. of this mol. in the $C^2\Pi$ state are presented. DWJF

спав.
носу

C.A. 1969.

71. 16

LaO

ВФ-2068-VIII

1969

2 Д326. Вращательный анализ системы индиго эмиссионного спектра молекулы LaO. Carette Pierre, Blondeau Jean-Marie. Analyse de la rotation du système indigo du spectre d'émission de la molécule LaO. «C. r. Acad. sci.», 1969, 268, № 26, B1743—B1745 (франц.)

В эмиссионном спектре LaO, возбужденном в печи Кинга при t -ре 2000° , наблюдаются полосы 0—0 и 1—1 перехода ${}^2\Pi_{3/2} \rightarrow {}^4\Sigma$ (I) и полосы 0—0, 1—1, 2—2, 3—3, 4—4 и 5—5 перехода ${}^2\Pi_{1/2} \rightarrow {}^4\Sigma$ (II). Проведен вращательный анализ полос 0—0 и 1—1 систем I и II. Получены следующие значения вращательных и молекулярных постоянных в состоянии ${}^2\Pi$ для $v=0$ и $v=1$ соответственно: $B_v=0,3460$ и $0,3436$ см^{-1} , $B_e=0,3471$ см^{-1} , $D_e=0,270$ и $0,260 \cdot 10^{-6}$ см^{-1} , $D_v=0,275 \cdot 10^{-6}$ см^{-1} , $\alpha_e=0,0023$, $r=1,843$ и $1,849$ Å, $\nu_{00}=22963,3$ см^{-1} $\Lambda=236,0$ см^{-1} . Библ. 6.

Э. В. Б.

Эмиссион.
спектр

9.19.40. 2A

Lao

1969

bio, to

Spangos.

lower

not used

Leo Brewer, Gerd Rosenblatt.

"Adv. in High Temp. Chem."

1969, 2, 1-83.

December 1969

LaO

VIII - 3741

1969

1 Д305. Интегральные интенсивности желто-зеленой системы полос монооксида лантана. Murthy N. Sreedhara, Nagasimhamurthy B. Integrated intensities of the greenyellow system of lanthanum monoxide bands. «Nature» (Engl.), 1969, 223, № 5202, 181—182 (англ.)

Методом гетерохромной фотографич. фотометрии измерены интегр. интенсивности полос LaO в желто-зеленой области, возбуждаемых медной дугой постоянного тока. Обсуждены методы, привлеченные для экстраполяции профилей интенсивности в случае перекрывающихся полос. Полученные данные позволили определить разницу в равновесных межъядерных расстояниях в системе LaO: $\Delta r_e = (0,032 \pm 0,002)$ А. Это значение хорошо согласуется с данными других авторов, свидетельствуя о корректности примененной техники экстраполяции. Библ. 11. В. Н. Ш.

интенсивн.

9. 1970. 19

LaO

VII - 3441

1969

55132r. Integrated intensities of the green-yellow system of lanthanum monoxide bands. Murthy, N. Sreedhara; Murthy, B. Narasimha (Univ. Mysore, Mysore, India). *Nature* 1969, 223(5202), 181-2 (Eng). Integrated intensities of the LaO ($B \rightarrow X$) system were obtained by using heterochromatic photographic photometry. Bands were excited in a d.c. Cu arc with atm. pressure with La acetate in the lower electrode. In the case of overlapping adjacent bands, the extrapolation procedure of G. R. Hebert and D. C. Tyte (1964) was applied. The difference in the equil. internuclear sepns. of the LaO ($B \rightarrow X$) system was 0.032 ± 0.002 A.

FBJN

(B \rightarrow X
intensity.
 Δr)

C.A. 1969. 71. 12.

200

VII - 3810

1969

3 Д154. Программа Фортран для анализа вращательной структуры спектров двухатомных молекул. Suarez Carlos B., Gallardo Mario. A Fortran program to analyze the rotational structure of diatomic molecules. «J. Comput. Phys.», 1969, 4, № 3, 424—426 (англ.)

Составлена программа типа Фортран II для вычисления значений B' и B'' вращательной постоянной B в верхнем и нижнем состояниях заданного электронно-колебательного перехода двухатомной молекулы из частот линий вращательной структуры методом наименьших квадратов. В программе предусмотрен учет внутримолекулярных возмущений. Программа иллюстрирована на примере спектров молекул LaO^{16} и LaO^{18} . М. Р. Алиев

м. п.

(+1) общий III

09. 1980.

39



LaO

ommucca 4543

noel
1969

De Maria F.

(Do) 2° Simposio Internazionale
di dinamica delle
Reazioni chimiche sui le
flamme Quali Reazioni
in flusso.

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

1970
 8
 7

Каркин О. П., 22 VIII 3761.
 Изв. Акад. Наук СССР, Хим., 1970, №1, 4-6
 Важеннейшие свойства неорганических соединений
 жермиевых соединений, молекулярных
 соединений жермиевых соединений и соединений
 жермиевых соединений жермиевых соединений
 жермиевых соединений жермиевых соединений

Ю (5)

А, 1970, 72, №22, 114974н

LaO

B9 - VII - 4829

1970

op - yuu
uoteny.
nepicee

71505m True potential-energy curves for LaO, VO, and CP. Murthy, N. Sreedhara; Murthy, B. Narasimha (Dep. Post-Grad. Stud. Res. Phys., Univ. Mysore, Mysore, India). *J. Phys. B* 1970, 3(1), L15-L18 (Eng). True potential-energy curves for LaO ($B^2\Sigma$), VO ($A^2\Delta$), and CP ($A^2\Pi_1$) are constructed by the Rydberg-Klein-Rees (RKR) method and compared with the Morse curves. The half-widths are the same. RCBS

C.A. 1970 73.14



LaO

1970

1039014 High resolution study of the vibration structure of the ultraviolet system of the LaO molecule emission spectrum. Carette, Pierre; Houdart, Rene (Dep. Phys., Fac. Sci. Lille, Villeneuve-d'Ascq, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1970, 271(2),

110-12 (Fr). The uv system of the emission spectrum of LaO extends from 3440 to 3720 Å. Most of the bands are quadruple, degraded towards the violet, and show a rotational structure. A classification of the bands is given in 2 systems: *D-X* and *F-X*. Characteristic parameters are also given. The tests were carried out with a La electrode arc as the source at controlled pressure. The electrodes are 8 mm in diam.; the working current is ~15 A, and the air pressure ~10 torr.

BGJF

M.U.

C.H. 1970. 73.20

LaO

ВФ VII - 4829

1970

7 Д129. Точные кривые потенциальной энергии для молекул LaO , VO и CP . Murthy N. Sreedhara, Murthy B. Narasimha. True potential-energy curves for LaO , VO and CP . «J. Phys.», 1970, В3, № 1, L15—L18 (англ.)

Методом Ридберга — Клейна — Риса вычислены и приводятся в таблицах значения $\Gamma_{\text{макс}}$, $\Gamma_{\text{мин}}$ и полуширины для кривых потенциальной энергии молекул LaO ($\text{B}^2\Sigma$) для $\nu=0,1,2,\dots,10$, VO ($\text{A}^2\Delta$) для $\nu=0,1,2,\dots,8$ и CP ($\text{A}^2\Pi_1$) для $\nu=0,1,2,3,4$, где ν — колебательное квантовое число соответствующего электронного состояния. Вычисленные значения сравниваются с соответствующими значениями Γ и полуширины для кривых Морзе. Обнаружено, что полуширины одинаковы в обоих случаях.

В. А. Морозов

м.и.

ф. 1970.

48

+2

X

LaO

ВФ - VII - 3811

1970

20 Б223. Колебательный анализ зелено-желтой системы LaO^{18} . Suarez C. B. Vibrational analysis of the green-yellow system of La^{18}O . «J. Phys.» (Gr. Brit.), 1970, В3, № 5, 729—731 (англ.)

В области 5200—6300 А исследован спектр испускания молекулы LaO^{18} (I), возбуждавшийся в дуге низкого давл. при внесении металлич. La в атмосферу O_2^{18} (чистота 99,7%). Наблюдались система полос с $\Delta\nu = +2, +1, 0, -1, -2$. Определены следующие колебательные постоянные I (см^{-1}) $\nu_0 = 17884,89$, $\omega'_e = 696,00$, $\omega'_e x'_e = 1,83$, $\omega_e'' = 775,53$, $\omega_e'' = 2,06$. Из колебательных постоянных I определены колебательные постоянные молекулы LaO^{16} (II) (см^{-1}): $\omega'_e = 733,48$, $\omega'_e x'_e = 2,03$, $\omega_e^2 = 817,29$, $\omega_e'' x_e'' = 2,29$.
А. Александров

спектр
испуск.
1
м.ч.

X. 1970. 20

LaO

BP-VIII-3811

1970

(50397n) Vibrational analysis of the green-yellow system of La^{18}O . Suarez, Carlos B. (Dep. of Phys., Univ. of California, Berkeley, Calif.). *J. Phys. B* 1970, 3(5), 729-31 (Eng). By using a low-pressure arc source the band spectrum of La^{18}O has been obtained. The heads at 5200-6300 Å were analyzed and the vibrational consts. are: $\sigma_e = 17,884.89 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e' = 696.00 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e'x_e' = 1.83 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e'' = 775.53 \text{ cm}^{-1}$, and $\omega_e''x_e'' = 2.06 \text{ cm}^{-1}$. With these figures the recalcd. positions of the bands are in excellent agreement with the exptl. values.

RCBS

M. N.

J. E. Evers

C.A. 1970. 73.10

LaO

1971

Askermann R. J.,
Rach E. G.

D₀

J. Chem. Thermodyn.,
1971, 3, 24, 445.

(Cer. LaO) I

LaO

ВФР-4381-VIII

1971

16 Б131. Вращательный анализ ультрафиолетовых систем D и F спектра испускания молекулы LaO . Carrette Pierre, Houdart René. Analyse de la rotation des systèmes ultraviolets D et F du spectre d'émission de la molécule LaO . «С. г. Acad. sci.», 1971, 272, № 10, В595—В598 (франц.)

Проведен вращательный анализ систем полос D и F в спектре испускания молекулы LaO (I). Эти системы полос отнесены к электронным переходам I $D^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ и $F^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$. Определены молек. постоянные I в состоянии $D^2\Sigma^+$ [$B_0=0,3634$, $D_0=0,309 \times 10^{-6}$, константа

спектр
испуск.

X.1971.16

спин-вращательного взаимодействия $\gamma_0 = -0,293$, $\nu_{00} = 26959,98$, $B_e = 0,3643$, $\alpha_e = 0,0019$, $D_e = 0,310 \times 10^{-6}$ см⁻¹, $r_e = 1,796$ А, а также значения B_v , D_v и γ_v ($v=1,2$)]
 и в состоянии $F^2\Sigma^+$ ($B_0 = 0,3606$, $D_0 = 0,259 \times 10^{-6}$, $\gamma_0 = -0,229$, $\nu_{00} = 28049,16$, $B_e = 0,3618$, $\alpha_e = 0,0024$, $D_e = 0,259 \cdot 10^{-6}$ см⁻¹, $r_e = 1,802$ А, а также B_v , D_v , γ_v ($v=1,2$)). На основании отрицат. знака постоянных γ_v предполагается, что состояния $D^2\Sigma^+$ и $F^2\Sigma^+$ I подвержены возмущению состоянием $C^2\Pi$. А. П. Александров

ВФ-4381-VIII

1971

LaO

9 Д257. Вращательный анализ УФ-систем D и F эмиссионного спектра молекулы LaO. Carrette Pierre, Houdart René. Analyse de la rotation des systèmes ultraviolets D et F du spectre d'émission de la molécule LaO. «C. r. Acad. sci.», 1971, 272, № 10, B595—B598 (франц.)

л.п.

Проведен вращательный анализ полос D и F в спектре излучения молекулы LaO. Исследованные системы отнесены к переходам $D^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ и $F^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ соответственно. Получены значения вращательных постоянных для состояний $D^2\Sigma^+$ и $F^2\Sigma^+$. Константы спин-вращательного взаимодействия γ_v имеют отрицат. значения, причем абс. значение γ_v для состояния $F^2\Sigma^+$ быстро растет с ростом v . Библ. 5. Э. В. Б.

ф. 1971 9D

LaO P. Carotte, R. Houdart

1971

C.R. Acad. Sci. Paris 272, B, 595

Анализ брауниевской структуры у.р. спектров
D. и F спектра неметалла LaO.

$D^2\Sigma$	ν	B_ν	$D_\nu \cdot 10^6$	γ_ν	B_e	L_e	$D_e \cdot 10^6$	$Z_e(\text{Å})$
	2	0.3599	0.303	-0.289				
	1	0.3616	0.306	-0.251	0.3643	0.0019	0.31	1.796
	0	0.3634	0.309	-0.293				

$$V_{00}(D^2\Sigma - X^2\Sigma) = \bullet 26959.98$$

H_u колеб. коэф., K_u парам колеб. -1, 1-0, 2-1 ^{измер.} коэф.

$F^2 \Sigma^+$

v	B_v	D_J	γ	B_e	λ_e	$D_e \cdot 10^6$	$r_e (\text{Å})$
2	0.3558	0.257	-0.262				
1	0.3582	0.258	-0.275	0.3618	0.0024	0.259	1.802
0	0.3606	0.259	-0.229				

$$\gamma_{00}(F^2 \Sigma^+ - X^2 \Sigma) = 28049.16$$

γ - поправка, см. вращ. взаимодействие.

LaO

39891
оттиски 5913

1971

12 Д346. Анализ вращательной структуры системы $C^2\Pi_r - A'^2\Delta_r$ молекулы LaO. Green David W. Rotational analysis of the $C^2\Pi_r - A'^2\Delta_r$ electronic transition in LaO. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 38, № 1, 155—174 (англ.)

Спектр молекулы LaO возбуждался в дуге между лантановым и медным электродами при давлении воздуха ≥ 1 мм рт. ст. и фотографировался с дисперсией 0,4—0,5 Å/мм. На основании анализа вращательной структуры двух систем полос в области 6500—6820 Å, ранее приписанных переходам из E- и G-состояний, показано, что они являются подсистемами одного электронного перехода $C^2\Pi_r - A'^2\Delta_r$. Приведены таблицы частот вращательных линий P-, Q- и R-ветвей и рассчитаны вращательные константы состояний $C^2\Pi_r$ и $A'^2\Delta_r$. Библи. 26.

В. Александров

ш.к.

hhhh - III - 69

Ф. 1971. 127

LaO

Bp-4381-VIII

1974

148613a Rotational analysis of the D and F ultraviolet systems of the emission spectrum of the lanthanum(II) oxide molecule. Carette, Pierre; Houdart, Rene (Fac. Sci. Lille, Lille, Fr.). C. R. Acad. Sci., Ser. B 1971, 272(10), 595-8 (Fr). The uv spectrum of LaO, obtained with high resolu., showed that the D and F band systems are due, resp., to the $D^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ and $F^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ transitions to the ground state of the mol. Values are given of the rotational, centrifugal distortion, and spin-rotational interaction consts. of LaO in the $D^2\Sigma^+$ and $F^2\Sigma^+$ states.

BGJF

u.n.

C. J. 1974. 4. 26.

LaO

ВФ-5400-VIII

1971

У 14 Б118. Колебательные постоянные электронных состояний $C^2\Pi$ $A'^2\Delta$ и $X^2\Sigma^+$ молекулы LaO. Green David W. Vibrational constants of the $C^2\Pi$, $A'^2\Delta$ and $X^2\Sigma^+$ electronic states of LaO. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 40, № 3, 501—510 (англ.)

Исследован эмиссионный спектр молекулы LaO, образованной в дуге постоянного тока. Выполнен анализ колебательной структуры систем полос электронных переходов $C^2\Pi_r \rightarrow A'^2\Delta_r$ и $C^2\Pi_r \rightarrow X^2\Sigma^+$. Из наблюдаемых границ полос с учетом разности вращательной энергии, соответствующей границе полос, Λ -удвоения и сверхтонких эффектов вычислены частоты центров 44 полос системы $C^2\Pi_{1/2} \rightarrow X^2\Sigma^+$, 17 полос системы $C^2\Pi_{3/2} \rightarrow X^2\Sigma^+$, 13

М.Н.

2.

X. 1972

14

2686
510

системы $C^2\Pi_{1/2} \rightarrow A'^2\Delta_{3/2}$ и 6 полос системы $C^2\Pi_{3/2} \rightarrow A'^2\Delta_{5/2}$. отмечено, что вращательная поправка к частоте, соотв-щей началу полосы, для нек-рых полос достигает 25 см^{-1} . Из полученных значений частот центров полос вычислены энергетич. термы T_e , частота колебания ω_e и постоянные ангармоничности $\omega_e x_e$ и $\omega_e y_e$ (см^{-1}) соотв.: $C^2\Pi_{3/2}$ 22847,7, 801,14, 3,291, 0,0231, $C^2\Pi_{1/2}$ 22631,3, 792,37, 2,919, 0,0187; $A'^2\Delta_{5/2}$ 8190,1, 773,37, 3,229, 0,0131; $A'^2\Delta_{3/2}$ 7493,4, 768,20, 2,990, 0,0296, $X^2\Sigma^+$ 0, 817,26, 3,097, 0,0406;

М. Р. Алнев

MO и MO₂, 2-е
M-перкоземельн. и-т (vi) ¹⁹⁷¹
VIII 4314

De Kock R. L., Weltner W.,
J. Phys. Chem., 1971, 75,
514-525

10
лет дружи

LaO

оттисек 5914

1971

4 Д358. Анализ вращательной структуры системы $C^2\Pi-X^2\Sigma^+$ LaO. Green David W. Rotational analysis of the $C^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ electronic transition of LaO. «Can. J. Phys.», 1971, 49, № 20, 2552—2564 (англ.)

Спектр молекулы LaO в области 4400 Å возбуждался в дуге при пониженном давлении и фотографировался с дисперсией 0,4 Å/мм. Проведен анализ вращательной структуры полосы 0—0 перехода $C^2\Pi-X^2\Sigma^+$ и определены вращательные константы основного и возбужденного состояний. В силу спинового взаимодействия неспаренного электрона с ядром La, относящегося к типу b, вращательные уровни основного состояния расщеплены на $0,51 \text{ см}^{-1}$. Вращательные уровни состояния $C^2\Pi$ испытывают сильное Λ -расщепление. Нулевые частоты полос $C^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma^+$ и $C^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ равны соответственно 22839,61 и 22618,87 см^{-1} . Приведены таблицы частот вращательных линий. Библ. 21. В. Александров.

(м.п.)

0005-1111-689

Ф. 1972. 49.

omnium 5914

1971

LaO.

156462m Rotational analysis of the $C^2\Pi_r \rightarrow X^2\Sigma^+$ electronic transition of lanthanum oxide. Green, David W. (Dep. Phys., Univ. Chicago, Chicago, Ill.). *Can. J. Phys.* 1971, 49(20), 2552-64 (Eng). A rotational anal. of the 0-0 band of the LaO $C^2\Pi_r \rightarrow X^2\Sigma^+$ transition near 4400 Å has revised the previously reported anal. The $C^2\Pi$ state is also the upper state of previously analyzed bands near 6500 Å. The X state of LaO is $^2\Sigma^+$ and an interaction between the unpaired electron and the La nuclear spin causes a doubling (0.51 cm^{-1}) of each rotational level. This splitting appears to show a slight rotational dependence and a negligible vibrational dependence. The coupling of the $X^2\Sigma^+$ state is nearly pure case $b\beta_s$. The $C^2\Pi_r$ exhibits a large Λ doubling. The 0-0-subband origins are at 22,839.61 for the $C^2\Pi_{3/2} \rightarrow X^2\Sigma^+$ and 22,618.87 cm^{-1} for the $C^2\Pi_{1/2} \rightarrow X^2\Sigma^+$. Rotational spectroscopic consts. are reported.

U.N.

0275-5720
117-117
B-7-117-117

C.A. 1971. 75-26

200

оттиски 5914

1971

6 Б161. Анализ вращательной структуры электронного перехода. $C^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ LaO. Green David W. Rotational analysis of the $C^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ electronic transition of LaO. «Can. J. Phys.», 1971, 49, № 20, 2552—2564 (англ.)

Исследован эмиссионный спектр молекулы LaO с высоким разрешением. Идентифицирована вращательная структура колебательной полосы 0—0 электронного перехода $C^2\Pi_r \rightarrow X^2\Sigma^+$ вблизи 4400 Å. С учетом взаимодействия электронного спина неспаренного электрона с ядерным спином La и суммарного спина с вращением и

М. П.

5914
ВР-177
177-164

ЭЖС, 1972, № 6

Λ -удвоения получена ф-ла для вращательных уровней состояния $X^2\Sigma^+$, к-рая применена при анализе спектра. Определены энергетич. термы $T_0=22618,87(C^2\Pi_{1/2})$, $22839,61(C^2\Pi_{3/2})$, $0(X^2\Sigma^+)$, эффективные значения вращательной и центробежной постоянных и постоянная спин-спиновой взаимодействия $4b=0,51 \text{ см}^{-1}$ состояния $X^2\Sigma^+$. Большая величина b показывает, что АО неспаренного электрона является гл. обр. $4s$ -орбиталью и центрирована на La. Зависимость постоянной b от вращательного состояния слабая.

М. Р. Алиев


~~LaO~~
~~energ~~

Office 5914
D. W. Green

1971

Can. J. Phys, 1971, 49, No. 20, 2552

Rotational analysis of the
 $C^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ electronic tran-
sition of LaO.

Спектр LaO ~~состоит~~^{покрыт} в виде низкого габри-
 тизма и имеет с шириной $0,4 \text{ \AA}/\text{мм}$
 Термостат Браунат. анализ $O-O$ по-
 лоси LaO перехода $C \rightarrow X$ около 4400 \AA
 Показано, что) Верхнее состояние C^2P ,
 этот переход обильнее с переходом ~~$C^2P \rightarrow A^2\Delta$~~
 $C^2P - A^2\Delta$, а нижнее X состояние есть
 $X^2\Sigma^+$. Расщепление X -состояния LaO ,
 ранее приписывавшееся также еффу-
 туре $4\Sigma^+$ обусловлено магнитным
 сверхтонким взаимодействием
 между квантами  квант деброя


и в ядерных синах Σ^+ . Величина
на это расщепление очень слабо
зависит от энергии квантового шара

$$\Delta U_H = 0,484 + 0,00034 \text{ эВ} \quad (\text{в пределах}$$

точности эксперимента) и не зависит
от колебательного квантового шара

Проверено на сечениях $0-0$ ^{полюсов} ~~и т.д.~~

$C^{17} \rightarrow X^2 \Sigma^+$ ^{визит} $\nu'' = 10$ с ^{точн.}
сего $\sim 0,03 \text{ см}^{-1}$).

Состояние $X^2 \Sigma^+$  - пример почти
чистого сдвига ν'' в ν'' .

Получены следующие значения ν'' как след.

ТБП:	$C^2 17_{1/2}$	$C^2 17_{3/2}$	$X^2 \Sigma^+$	Error
$B(\nu=0)$	0,3494	0,3510	0,3518	0,0002
$D(\nu=0) \times 10^6$	0,27	0,28	0,26	0,01
$4B$			0,51	0,01
A	221,44			0,04
T_0	22618,87	22839,61	0,00	0,02

b - постоянная сверхтонкого ~~и~~ спинового расщепления.

LaO

Ommeu 5913

1971

117814n) Rotational analysis of the $C^2\Pi_r \rightarrow A'^2\Delta_r$ electronic transition in lanthanum oxide. Green, David William (Dep. Phys., Univ. Chicago, Chicago, Ill.). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 38(1), 155-74 (Eng). Rotational anal. of the (0,0) and (1,1) bands of 2 violet-degraded band systems between 6500 and 6825 Å has shown they are subbands of a $^2\Pi_r \rightarrow ^2\Delta_r$ electronic transition. The upper state is in common with the upper state of the previously known $C^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ transition. The transition is called $C^2\Pi_r \rightarrow A'^2\Delta_r$. The $A'^2\Delta_r$ state is probably the expected low-lying state deprived primarily from a (La $d\delta$) MO configuration. The abs. electronic term values, T_e , of the $C^2\Pi_r$ and $A'^2\Delta_r$ state were not detd. RCKP

M.N.

4444-1111-69

C.H. 1971. FY. 22

LaO

оттиски 5913

1971

U22 Б133. Анализ вращательной структуры системы полос электронного перехода $C^2\Pi_r \rightarrow A'^2\Delta_r$ молекулы LaO. Green David W. Rotational analysis of the $C^2\Pi_r \rightarrow A'^2\Delta_r$ electronic transition in LaO. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 38, № 1, 155—174 (англ.)

Исследован эмиссионный спектр молекулы LaO в дуговом разряде. Между известными системами полос переходов $A^2\Pi_r \rightarrow X^2\Sigma^+$ и $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ в области 6500—6825 Å обнаружены слабые полосы, отнесенные в фиолетовую область, к-рые отнесены к электронному переходу $C^2\Pi_r$ ($r=1/2, 3/2$) $\rightarrow A'^2\Delta_r$ ($r=3/2, 5/2$). Выполнен анализ вращательной структуры полос 0—0 и 1—1 подсистем $r=1/2 \rightarrow 3/2$ и $3/2 \rightarrow 5/2$. Определены эффективные значения вращательной и центробежной постоянных уровней C и A, а также постоянной Λ -удвоения уровня $C^2\Pi$.

М. Р. Алнев

ш. н.

54444 - VIII - 69

X. 1971. 22

LaO

BQP - 5400 - VIII

1971

29237n² Vibrational constants of the $C^2\Pi$, $A'^2\Delta$, and $X^2\Sigma^+$ electronic states of lanthanum monoxide. Green, David W. (Dep. Phys., Univ. Chicago, Chicago, Ill.). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 40(3), 501-10 (Eng). Band heads of the LaO $C^2\Pi$, $\rightarrow A'^2\Delta$, and $C^2\Pi$, $\rightarrow X^2\Sigma^+$ electronic transitions were measured. Band origins, calcd. from the obsd. heads and known rotational consts., were used to derive vibrational consts. and electronic term energies T_e for the $C^2\Pi$, $A'^2\Delta$, and $X^2\Sigma^+$ electronic states of LaO.

M. N.

C.A. 1972. 76. 6

1941

ommuca 7398
BP-VIII-5191

LaO,
YO, ScO

Te ($A'^2\Delta$)

(1353630) Low-lying electronic states of the scandium oxide, yttrium oxide, and lanthanum oxide molecules. Green, David W. (Dep. Phys., Univ. Chicago, Chicago, Ill.). *J. Phys. Chem.* 1971, 75(20), 3103-6 (Eng). Evidence is presented that the low-lying electronic states of ScO, YO, and LaO can be interpreted in terms of MO which are closely approximated as metal-centered AO. Quant. predictions are made of the excitation energies of the unobsd. $A'^2\Delta$ states of ScO and YO. These two $^2\Delta$ states are not of importance to the partition function in the temp. range of interest and spectroscopic transitions involving these states will be difficult to observe.

Kb. mex
paerent

(+2)

C.A. 1941. 45 22

see Tarnes ScO. III

LnO (газ)

1971

19 Б134. Систематическое изучение распада очень малых количеств окислов лантанидов в присутствии нагретого металлического рения. Nguyen-Long-Den, De Saint-Simon M. Systematic study of the decomposition of very small quantities of lanthanide oxides in the presence of heated metallic rhenium. «Adv. Mass Spectrom. Vol. 5». London, 1971, 413—416 (англ.)

Д.
Масс-спектрометрическим методом исследован процесс распада моноокислов лантанидов по схеме $MO(g) \rightarrow M(g) + O(g)$, путем измерения величины отношения ионных токов $i(M^+)/i(MO^+)$ при различных T -рах. Для получения более высокой чувствительности использовался метод поверхностной ионизации образцов на нагретом рениевом катоде. Получено выражение $i(M^+)/$

X. 1972. 19

$i(\text{MO}^+) = \exp[B(Z) - D_0^0/kT]$, где D_0^0 — энергия диссоциации MO, зависящая от энергии перехода из электронного состояния $4f^{n-1}5d$ в $4f^n$; T — абс. т-ра; k — постоянная Больцмана, $B(Z)$ — величина, характеризующая взаимодействие нагретого ренневого катода с молекулами MO и атомами M, в конечном счете связанная с радиусами атомов и атомным номером элемента.

Б. В. Розынов

$\text{CeO}_2, \text{Pr}_2\text{O}_3, \text{Tb}_2\text{O}_3 (\text{V}_i)$ 8 1974

$\text{CeO}, \text{Pr}_2\text{O}, \text{Tb}_2\text{O}, \text{La}_2\text{O}_3, \text{Gd}_2\text{O}_3, \text{Nd}_2\text{O}_3, \text{Sm}_2\text{O}_3,$
 $\text{Dy}_2\text{O}_3, \text{Ho}_2\text{O}_3, \text{Er}_2\text{O}_3, \text{Tm}_2\text{O}_3, \text{Lu}_2\text{O}_3 (\text{W}_e).$

VII 4477

Chemop & magazine

Weldner W., DeKock R.L.

(area)

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

Spectroscopy of rare earth oxide
molecules in CaF_2 inert matrices at 4K
10 (3) 20 Cd 1970, 74 (20), 105848c

LaO

7 Б160. Вращательные постоянные системы полос В—Х полосатого спектра молекулы LaO^{18} . Suárez C. B. Rotational constants of the В—Х system of La^{18}O band spectrum. «Chem. Phys. Lett.», 1972, 16, № 3, 515—516 (англ.)

Исследован с высоким разрешением эмиссионный спектр молекулы LaO^{18} в электрич. разряде. Идентифицирована вращательная структура полосы 0—0 электронного перехода ${}^2\Sigma - {}^2\Sigma_g$ при 5600 Å и определены значения молек. постоянных для этого перехода.

Обнаружено спиновое расщепление верхнего уровня $\sim 8 \text{ см}^{-1}$. М. Р. Алнев

(м.п.)

1972.

681-6555 - 187
VII - III

X. 1973. № 7

LaO

VIII-5339-ВФ

1972.

3 Д415. Анализ вращательной структуры полосы 0—0 системы В—Х La^{18}O . Su á rez C. B. Rotational constants of the В—Х system of La^{18}O band spectrum. «Chem. Phys. Lett.», 1972, 16, № 3, 515—516 (англ.)

(м.н.)
Спектр излучения полос системы В—Х молекулы La^{18}O возбуждался в дуге постоянного тока между медным и лантановым электродами в атмосфере $^{18}\text{O}_2$ при низком давлении. В результате анализа вращательной структуры полос 0—0 при 5600 \AA показано, что система В—Х принадлежит переходу $^2\Sigma - ^2\Sigma_{\beta,s}$ и определены значения констант (в cm^{-1}): $B'_0 = 0,304$, $B''_0 = 0,314$, $D'_0 = D''_0 = 2 \cdot 10^{-7}$, $\gamma'_0 = 0,254$ и $4b = 0,45$. По типу связи основное состояние относится к случаю $b_{\beta s}$; ожидаемого перехода к типу связи $b_{\beta J}$ не обнаружено.
Библ. 10. В. Александров

Ф. 1973. № 3.

LaO

VIII - 5339 - B9

1972

B-X
const

170753e Rotational constants of the B-X system of lanthanum oxide- ^{18}O band spectrum. Suarez, C. B. (Univ. Nac. La Plata, La Plata, Argent.). *Chem. Phys. Lett.* 1972, 16(3), 515-16 (Eng). The emission spectrum of La^{18}O was photographed at high resolu. and the rotational const. of the 0-0 band at 5600 Å are reported. The transition is assigned as $^2\Sigma-^2\Sigma_{\beta S}$ and the fine doubling in the spectrum is attributed to magnetic hyperfine structure. The ground state is reported as a good example of a $b_{\beta S}$ coupling case and uncoupling leading to a $b_{\beta J}$ case was not detected.

C.A. 1972, 77, N26.

LaO

Оттиски 1788

1973

м.п.

6 Д402. Сверхтонкая структура перехода $B^2\Sigma-X^2\Sigma$ молекулы LaO. Bacis R., Collomb R., Bessis N. Hyperfine structure of the $B^2\Sigma \rightarrow X^2\Sigma$ transitions of the LaO molecule. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1973, 8, № 5, 2255—2265 (англ.)

С помощью интерференционного спектрометра исследована сверхтонкая структура полосы 0—0 перехода $B^2\Sigma-X^2\Sigma$ молекулы LaO, возбуждаемой в полом катоде с вспомогательным разрядом, испаряющим LaO из сплавов La—La₂O на стенках разрядной трубки. Точные измерения контура линий и их полуширины позволили выявить вклад тонкой и сверхтонкой структур. Удовлетворительное объяснение, зависимости интенсивности компонент от N может быть получено в предположении промежуточного типа связи $b\beta_s-b\beta_l$ для основного состояния. Сопоставление теории с экспериментом дает значения параметров тонкой и сверхтонкой структуры (в 10^{-3} см⁻¹); для $X^2\Sigma-\gamma_s^R=2,57\pm 0,25$ и $b=123,5\pm 1,8$; для $B^2\Sigma-b'=21,7\pm 2,0$ и $c'=-5\pm 12$. Библиограф. 36. В. А.

2865-III

Ф. 1974
№ 6

LaO

Summer 1788

1973

$B^2\Sigma \rightarrow X^2\Sigma$

VIII - 5982

(u.n.)

32225t. Hyperfine structure of the $B^2\Sigma \rightarrow X^2\Sigma$ transition of the lanthanum monoxide molecule. Bacis, R.; Collomb, R.; Bessis, N. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., CNRS, Villeurbanne, Fr.). *Phys. Rev. A* 1973, 8(5), 2255-65 (Eng). The 0-0 band of the $B^2\Sigma \rightarrow X^2\Sigma$ transition of LaO was studied by using an interference spectrometer and a dressed-walls hollow cathode. The accuracy allows a detailed study of nuclear hyperfine effects. A theor. interpretation of exptl. results is proposed which in-

C.A. 1974. 80 N 6

cludes residual fine- and hyperfine-interaction contributions. A satisfactory explanation of the variation with N of the intensities is obtained when introducing intermediate coupling $b_{g_1}b_{g_2}$ effects in the ground state. From the comparison between expl. and theor. results, the following values of some hyperfine- and fine-structure parameters are deduced, i.e., for the $X^3\Sigma$ state $\gamma_{sk} = 2.57 \pm 0.25$ and $b = 123.5 \pm 1.8$ millikaysers, and for the $B^3\Sigma$ state $b' = 21.7 \pm 2.0$ and $c' = -5 \pm 12$ millikaysers.

40918.1221

TC, Ph

34457
LaO

1974

2431

Dongre M.B. — The evaluation of the
electronic transition moment for the
 $B^2\Sigma - X^4\Sigma$ system of LaO.

"Indian J. Phys.", 1974, 48, N4, 289-293

(англ.)

0192

179 179

ВИНИТИ

Lao
3285

Liu Ming Bann Wahbeek P.G.
h761

Do

High Temp. Sci., 1974,
6, p. 175

Loewig P. 1974

May-117

Do (Lao)

41219.8477

Ch, Ph, TC

Кол. букв. букв. 43929 02

LaO

1974

2814

Mar^{añon} Julio, Suarez Carlos B.
Franck-Condon factors and R-centroids
 for the B-x transition of La¹⁶ O and La¹⁸ O,
 including rotation-vibration interaction.
 "Spectrosc. Lett.", 1974, 7, N 7, 303-309

(англ.)

0260 шик

231 236 0 2 5 2

ВИНИТИ

Lao

coll. no. 2860
*U-4795 1974.

2860
Gammack

Rauh E.G.
Ackermann R.F.

(7)
"J. Chem. Phys."
1974, 60, N4, 1396-1400.

LaO

XIII - 131

1974

M.N.

31486q Electronic transitions of the lanthanum monoxide molecule. Schoonveld, L.; Sundaram, S. (Dep. Phys., Univ. Illinois, Chicago, Ill.). *Astrophys. J., Suppl. Ser.* 1974, 27(246), 307-18 (Eng). A complete anal. of all available exptl. data on the LaO mol. was made for use in stellar absorption studies. A valid and consistent set of vibrational consts. was derived for each of the known electronic states of the mol. Potential energy curves (Rydberg-Klein-Rees and Morse) were constructed. Franck-Condon factors and r -centroids were calcd.

C.A. 1974. 81. NY

Lao ommeu 7424 noice 1975

Bole F.L.; Chalok C.L.

Vi npennum

Characterization of the
ground and excited states
of Lao . ●

O-6a

oium. 4894

1975

Kerr J. A., et al.

(Do)

Handbook Chem. Phys.,
55th Ed., 1974-75.

LaO

YO

ScO

спектр
хемилуминесценции

Физ. пучки. (42)
ФР/976 N 4

4 Д861. Исследование методом молекулярных пучков хемилуминесцентных реакций атомов группы IIIb с O₂. Manos D. M., Parson J. M. Crossed molecular beam study of chemiluminescent reactions of Group IIIb atoms with O₂. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 8, 3575—3585 (англ.)

В скрещенных молекулярных пучках с высоким разрешением (использован накопитель сигналов и ЭВМ) получены спектры хемилуминесценции реакций атомов La, Y и Sc с O₂ в видимой области. В условиях однократных соударений атомов с O₂ идентифицированы следующие электронные состояния эмиттеров — окислов: LaO—A²Π, B²Σ⁺ и C²Π; YO—A²Π; ScO—A²Π. Проведен анализ колебательно-вращательной структуры спектров и рассчитаны относит. константы скорости заселения колебательных и электронных состояний эмиттеров в зависимости от энергии соударения (от 2 до 8 ккал/моль), регулируемой т-рой пучка O₂. В пределах погрешности эксперимента как распределение продуктов по колебательным уровням, так и его вариации с энергией столкновения хорошо согласуются с рассчитанными в рамках статистич. модели. Р. В.

LaO, YO, ScO *ammun* 3499

1975

chemsp

Xenon

Mon. kyre

(+2)

☒

199799j Crossed molecular beam study of chemiluminescent reactions of Group IIIB atoms with molecular oxygen. Manos, D. M.; Parson, J. M. (Dep. Chem., Ohio State Univ., Columbus, Ohio), *J. Chem. Phys.* 1975, 63(8), 3575-85 (Eng). Crossed-mol. beams were used to study reaction of O₂ with La to form electronically excited LaO ($A^2\Pi$, $B^2\Sigma^+$, and $C^2\Pi$), with Y to form YO ($A^2\Pi$), and with Sc to form ScO ($A^2\Pi$). No other emitters are obsd. under single-collision conditions. Relative rate consts. for forming product vibrational and electronic states. exd. from wavelength scans, are close to predictions made by prior statistical distributions obtained with no dynamic constraints. The collision energy dependences of the rate consts. for forming sp, vibrational states, detd. by varying the O₂ beam velocity, also are close to the prior predictions over a range of $\sim 2-8$ kcal/mole;

P. A. 1975. 83. N24

50407.7259
Ch, Ph, TC

La D 40892 / (y) *

1975

4-8625

Rauh E.G., Ackermann R.J.

(см. №; III)

The first ionization potentials of
neptunium and neptunium monoxide.

"J.Chem.Phys.", 1975, 62, N 4, 1584

(англ.)

0338 пик

306 311 330

ВИНИТИ

Lao

ommuch 5969 1975

Rauh E. G., et al.

No

Can. Metall. Quart.
1975, 14, 205-11

LaO ammuca 739† mc. 1975.

Gole J. L.

M. N.

npeupucem.

Evidence for an Inflected
 $D^2\Sigma^+$ State in LaO.

LaO
LaO⁺

оттиски 5910

1976

3 Б64. Термодинамика ионизации окислов в газовой фазе; первые потенциалы ионизации лантанидов и их моноокислов. Askermann R. J., Rauh E. G., Thorn R. J. The thermodynamics of ionization of gaseous oxides; the first ionization potentials of the lanthanide metals and monoxides. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 3, 1027—1031 (англ.)

Путем измерения кривых эффективности ионизации лантанидов Ln с порядковыми номерами Z=56—73 и моноокислов LnO при электронном ударе в газовой фазе, определены их Пт появления и Пт ионизации (ПИ). Полученные результаты для металлов хорошо согласуются со спектроскопич. данными и с данными измерений методом поверхн. ионизации. При малых Z

(80)
(7)

№ 1974 N 3

ПИ LnO меньше ПИ Ln , а при больших Z наоборот. Показано, что разница в ПИ LnO и Ln связана с энергиями диссоциации $D_0(LnO)$ и $D_0(LnO^+)$. Определены $D_0(LnO^+)$. Хим. связь в LnO и LnO^+ интерпретирована в рамках электростатич. модели. Получены эмпирич. соотношения, связывающие межатомные расстояния в LnO в электростатич. параметр отталкивания с числом электронов вне оболочки $5p^6 Ln^{2+}$, а также энергии поляризации атомов с энергиями $4f^n \rightarrow 4f^{n-1} 5d$ -переходов. С помощью этих соотношений легко описываются закономерности в изменениях $D_0(LnO)$. С помощью аналогичного приема (но без учета энергии $f \rightarrow d$ -переходов) описаны изменения $D_0(LnO^+)$. По резюме

Ln
LnO
=

(Do)

C.A. 1976
85 N 18

85: 130891g The thermodynamics of ionization of gaseous oxides; the first ionization potentials of the lanthanide metals and monoxides. Ackermann, R. J.; Rauh, E. G.; Thorn, R. J. (Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1976, 65(3), 1027-31 (Eng). By using the previously described (R. and A., 1974, 1976) app. and exptl. methods, the 1st ionization potentials of the gaseous lanthanide (Ln) metals and monoxides (LnO) were detd. by electron impact from the appearance potentials of ionization efficiency curves. The results for the metals agree with the existing values obtained from spectroscopic and surface-ionization studies. In the early part of the lanthanide sequence, the ionization potentials of LnO(g) are less than those of Ln(g), whereas the converse is true in the latter part. The differences in the ionization potentials of LnO(g) and Ln(g) were simply related to the differences in the dissocn. energies (D_0) of LnO(g) and LnO*(g). Values of $D_0(\text{LnO}^*)$ were derived. The nature of the chem. bonding in LnO(g) and LnO*(g) was examd. for the lanthanide sequence by means of an electrostatic point-charge model. The assumptions of the monotonic variations of the interat. distance and the electrostatic-repulsion parameter, and of the nonmonotonic variation of the polarization energy derived from the known *f*-to-*d* electronic transitions are all mutually consistent, and describe rather closely the variation in bonding in LnO(g). A similar scheme without the *f*-to-*d* transition energies describes the variation in the bonding of LnO*(g).

1976

0155 mmmms

*13-16878

1976

LaO

12 Б1200. Характеристики основного и возбужденных состояний окиси лантана, возникающей при бимолекулярном окислении металлического лантана под действием O_2 , NO_2 , N_2O и O_3 . Gole James L., Chalek Carl L. Characterization of the ground and excited states of lanthanum oxide through bimolecular oxidation of La metal with O_2 , NO_2 , N_2O , and O_3 . «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 11, 4384—4395 (англ.)

Do, ΔHv

Изучены спектры испускания, возникающие при хемилюминесцентной р-ции в условиях однократных соударений при прохождении теплового пучка атомов La (т-ра печи 1750—2400° K) через камеру, заполненную газ. окислителем при давл. 10^{-6} — 10^{-4} мм и т-ре 300° K. В р-ции атомов La с O_2 возникает видимая хемилюминесценция (Хл) из состояний $B^2\Sigma^+$ и $C^2\Pi$ LaO. В р-циях La с NO_2 , N_2O и O_3 возникает Хл из состояний $B^2\Sigma^+$, $C^2\Pi$ и $D^2\Sigma^+$ LaO. Кроме того, во всех 4 системах наблюдается интенсивная Хл из $A^2\Pi$ -состояния

III
BP-1594-XVII

X. 1977. №12

(+1) LaO; ΔHv

LaO. На основании спектра Хл в системе La—O₂ найдено, что энергия диссоциации $D_0^0(\text{La—O}) \geq 8,19 \pm \pm 0,04$ эв, что хорошо согласуется с известными из лит-ры масс-спектрометрич. данными. На основании т-рных зависимостей интенсивности Хл найдены верхние оценки теплот испарения металлич. лантана, составляющие $102,96 \pm 5,46$; $96,76 \pm 3,40$; $100,44 \pm 6,54$ и $101,21 \pm 2,24$ ккал/моль (системы с различными окислителями). Различия спектров Хл в зависимости от типа окислителя объяснены на основании правил слабой спин-орбитальной корреляции уровней атомов La(²D и ⁴F) с уровнями LaO, возникающей в реакции.

В. Е. Скурат

LaO

4-16878

1976

6 Д867. Характеристики основного и возбужденного состояния LaO, полученные из исследований бимолекулярных реакций окисления La при взаимодействии с O_2 , NO_2 , N_2O и O_3 . Gole James L., Chalek Carl L. Characterization of the ground and excited states of lanthanum oxide through biomolecular oxidation of La metal with O_2 , NO_2 , N_2O , and O_3 . «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 11, 4384—4395 (англ.)

С помощью метода взаимодействия атомарного пучка La при т-ре 1750—2400° К с газовой мишенью (O_2 , NO_2 , N_2O , O_3) при т-ре 300° К и давл. 10^{-4} — 10^{-6} мм рт. ст. исследована хемилюминесценция (Хл) с разрешением до 1 Å в спектральной области 300—700 нм. Зарегистрированы полосы Хл, принадлежащие электронно-колебательным переходам из состояний $A^2\Pi$, $C^2\Pi$, $B^2\Sigma^+$ и $D^2\Sigma^+$ молекул LaO. Из измерений зависимости интенсивности Хл от давления окислителей и интенсивности пучка La сделан вывод, что реакции образования LaO в состоянии $C^2\Pi$ имеют первый

ш.п. до

4.1977 №6

11111
B99-7594-XVIII

порядок относительно каждого реагента. Оценены верхние пределы поперечных сечений реакций окисления $\text{La} + (\text{O}_2, \text{NO}_2, \text{N}_2\text{O})$, равные 103, 137 и 114 Å^2 соответственно. Из анализа спектра Хл системы $\text{La} + \text{O}_2$ определена нижняя граница значений энергии диссоциации $D_0^0(\text{LaO}) = 8.19 \pm 0.04$ эв, хорошо согласующаяся со значениями, найденными ранее масс-спектрометрич. методом. Измерены зависимости интенсивности Хл из состояний ($C^2\Pi_{3/2}, v'=0$) и ($D^2\Sigma^+, v'=0$) LaO в реакциях La с N_2O , NO_2 и O_2 от т-ры печи, формирующей пучок атомов La , и обсуждена возможность определения энергий активации реакций окисления La из этих данных. Библ. 55. С. Л.



LaO

Jones Roger W.,
Cole James L.

1977

"Chem. Phys.", 1977,
20, N 3, 311-318

(cu. n.)
do

(cu. LaS, cu. n.) III

LaO

1977

8 Д152. О кривых потенциальной энергии молекулы LaO. Behere S. H., Sardesai P. L. On the potential energy curves of LaO molecule. «Pramana J. Phys.», 1977, 8, № 2, 108—113 (англ.)

Для электронных термов $X^2\Sigma$, $A^2\pi_{3/2}$, $A^2\pi_{1/2}$, $B^2\Sigma$ молекулы LaO вычислены точки поворота в колебательных состояниях $v=0-11$. Расчет выполнен двумя способами: по методу Ридберга — Клейна — Риса, а также по методике Вайдана и Сантарама (РЖФиз, 1970, 8Д120). Для основного электронного состояния, кроме того, потенц. ф-ция найдена с учетом электроотрицат. свойств составляющих атомов по методу Шоке и Байтца (РЖФиз, 1969, 5Д89). Вычисленная энергия диссоциации этого состояния равна 7,87 эв.
Б. Ф. Горднец

Кривые
потенциальной
энергии

Ф. 1977. № 8

had

Féménias J. h.

1977

science.

" Phys. Rev. A : Gen. Phys. ",
1977, 15, N4, 1625-1635.

μ.



(see. NBN) III

LaO

Gole J. L.,
Preuss D. R.

1977

"J. Chem. Phys.", 1977,
66, N7, 3000 - 3011.

Хемиски
p-уки

(ан. SeO) III

La O

Annuaire 1978

1978

Ackermann R. J., Rank E. G.

Rev. int. Mantes Jimp.

Refract; Fr., 1978, vol 15,

4.11.

pp 259-80.

LaO

ScO

YO

спектры
хемиллюминесценции

-

(+2) ⊗

Оттиск 6519

1978

24 Б1433. Хемиллюминесцентные реакции атомов группы III b с O₂. Модельные расчеты спектров и расширенная энергетическая зависимость. Manos D. M., Parson J. M. Chemiluminescent reactions of group IIIb atoms with O₂: Spectral simulations and extended energy dependence. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 231—236 (англ.)

Приведены модельные расчеты спектров хемиллюминесценции в р-циях атомов La, Y и Sc с O₂ и O₂-He в скрещенных молек. пучках при т-рах 280—1100 К при разных относит. кинетич. энергиях атомов РЗЭ и O₂. Приведены данные по колебательным заселенностям окислов указанных элементов ScO (A²Π_{1/2}, A²Π_{3/2}), YO (A²Π_{1/2}, A²Π_{3/2}), LaO (A²Π_{1/2}, A²Π_{3/2}, B²Σ, C²Π_{1/2}), .. а

U
t J.

Х. 1978, № 24

также параметры распределения по колебательным и вращательным состояниям для указанных окислов при разных кинетич. энергиях атомов и молекул O_2 . Показано, что в эндотермич. р-циях с образованием YO ($B^2\Sigma$) и ScO ($A^2\Pi_{1/2}$) наблюдаются существенные отклонения от предлагавшейся ранее теории с ростом относит. кинетич. энергии частиц. Для объяснения полученных расхождений рассмотрена модель двух тв. сфер, центры к-рых лежат на одной линии. А. Шведчиков

LaO



Вращат.-
- колебл.м.
взаимод.

12 Д152. Влияние вращательно-колебательного взаимодействия на интенсивность линий оптического спектра двухатомных молекул. The effect of rotation-vibrational interaction on the line intensities in the optical spectra of diatomic molecules. Kobylansky A. I. «Acta phys. Acad. sci. hung.», 1978, 45, № 4, 363—369 (англ.)

Теоретически исследовано распределение интенсивности линий электронно-колебательного спектра двухатомных молекул при учете вращательно-колебательного (ВК) взаимодействия. С этой целью вычислена поправка к матричному элементу электронно-колебательного перехода, рассчитанного в приближении Борна — Оппенгеймера. Поправка получена в первом порядке теории возмущения, где в качестве возмущающего гамильтониана используется эффективный потенциал, обусловленный учетом вращения. Рассчитанные поправки к интегр. коэф. поглощения и испускания электронно-колебательных переходов позволили оценить ошибку при определении вращательной t -ры опич. методом при условии пренебрежения ВК-взаимодействием. Результаты расчетов использованы также для интерпретации эксперим. данных $V^2\Sigma - X^2\Sigma$ переходов молекулы LaO.

Ю. Л. Малинкевич

1978

ф. 1649/12

LaO

1978

88: 179692u Rotational analysis of the $A^2I_1-X^2\Sigma$, $B^2\Sigma-X^2\Sigma$ and $C^2I_1-X^2\Sigma$ electronic transitions in lanthanum oxide. Korechoff, Robert Paul (Univ. California, Los Angeles, Calif.). 1977. 166 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. 7801721. From *Diss. Abstr. Int. B* 1978, 38(9), 4314.

U. N.



C.A. 1978, 22, 124

LaO

1978

91: 115160y Tables of Franck-Condon factors with regard to the vibrational-rotational interaction for astrophysically important molecules. IV. Lanthanum oxide (LaO). Tsybal, V. V. (Odess. Gos. Univ., Odessa, USSR). *Deposited Doc.* 1978, VINITI 831-78, 43 pp. (Russ). Avail. VINITI. The Franck-Condon factors were calcd. for the system of bands for LaO found in the spectra of S-stars.

Матвеева

Лин

Spick 9679

C.A., 1979, 21, N14

had

OM. 37 714a''

1948

Schenck P.K.

J. Chem. Phys., 1948, 69 (1),
5147-50.

спектр
пепуекан.

в пламенах



см. ScO

) III

1978

Zao

Wyckoff S., Clegg R. E. S.

Mon. Not. R. Astron. Soc.,
1978, 184 (1), 127-43.

crenup



Zao
cu. ~~II~~ ; III

LaO

11 Б267. Спектр оксида лантана. Повторный анализ данных по вращательной структуре. Bernard A., Sibal A. M. The spectrum of lanthanum oxide: a reanalysis of the rotational data. «Z. Naturforsch.», 1980, A35, № 12, 1313—1316 (англ.)

Выполнен повторный анализ всех имеющихся эксперим. данных по вращательной структуре полос $\nu' = 0,1 - \nu'' = 0,1$ переходов в видимой и ближней ИК области, включающих электронные состояния $A^2\Sigma^+$, $A^2\Delta_r$, $A^2\Pi_r$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Pi_r$ молекулы LaO. Равновесные молек. постоянные T_e , ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , α_e (в см^{-1}) и r_e (в Å): состояние $X^2\Sigma^+ - 0$; 817,22; 2,206; 0,35241; 0,00136; 1,8262; $A'^2\Delta_r - 7842,61$; 770,11; 2,798; 0,34367; 0,00144; 1,8493; $A^2\Pi_r - 13094,53$; 762,09; 2,230; 0,34696; 0,00160; 1,8405; $B^2\Sigma^+ - 17878,66$; 734,59; 2,064; 0,34128; 0,00156; 1,8558; $C^2\Pi_r - 22740,38$; 795,84; 2,796; 0,35093; 0,00137; 1,8301. Приведены также значения постоянных центробежного искажения D_0 и D_1 . Показано, что при обработке эксперим. данных необходимо учитывать поправки на центробежное искажение для постоянной

М.П.

Х.1981.ММ

1980

11508

ОТМЫСК

спин-орбитального взаимодействия $A(A_I, A_{II})$, постоянных Λ -удвоения $p(p_I, p_{II})$ и $q(q_I)$, постоянной спин-вращательного взаимодействия $\gamma(\gamma_I)$. Значения перечисленных постоянных равны (в см^{-1}): состояние $A'^2\Delta_r$, $v=0$ — $A=700,286$, $A_I=0,271 \cdot 10^{-3}$, $v=1$ — a , $0,231 \cdot 10^{-3}$; $A^2\Pi_r$, $v=0$ — $A=862,434$, $A_I=0,310 \cdot 10^{-3}$, $A_{II}=-0,8 \cdot 10^{-8}$, $p=-0,2674$, $q=-0,96 \cdot 10^{-4}$, $v=1$ — соотв. $862,434$, $0,31 \cdot 10^{-3}$, —, $-0,267$, $-0,96 \cdot 10^{-4}$; $B^2\Sigma^+$, $v=0$ — $\gamma=-0,2551$, $\gamma_I=-0,17 \cdot 10^{-6}$, $v=1$ — $\gamma=0,2547$; $C^2\Pi_r$, $v=0$ — $A=221,406$, $A_I=0,378 \cdot 10^{-3}$, $A_{II}=0,40 \cdot 10^{-9}$, $p=-0,1206$, $p_I=0,202 \cdot 10^{-6}$, $p_{II}=-0,23 \cdot 10^{-10}$, $q=-0,180 \cdot 10^{-3}$, $q_I=-0,39 \cdot 10^{-8}$, $v=1$ — $A=924,178$ — a , $A_I=0,345 \cdot 10^{-3}$, $p=-0,12025$, $q=-0,190 \cdot 10^{-3}$. Рассчитаны сумма по состояниям и значения $\lg K_p$ для р-ции $\text{LaO} \rightleftharpoons \text{La} + \text{O}$ ($T=1000-8000$ К).

В. М. Ковба

LaO

М.И.

1980

7 Д556. Спектр окиси лантана. Повторный анализ вращательной структуры. The spectrum of lanthanum oxide. A reanalysis of the rotational data. Bernard A., Sibaï A. M. «Z. Naturforsch.», 1980, A35, № 12, 1313—1316 (англ.)

Выполнен повторный анализ вращательной структуры полос в спектрах LaO в широкой области от УФ до ближней ИК. Большая часть имеющихся данных получена методом «прямого приближения» с использованием полных матриц Гамильтона для описания состояний Π и Δ . В настоящей работе показано, что для повышения достоверности отнесения линий в спектрах необходимо учитывать эффекты центробежного растяжения, спин-орбитального взаимодействия, λ -удвоения и пр. Получены исправленные константы диссоциативного равновесия для молекул LaO в области т-р 1000—8000 К. Приведены спектроскопич. постоянные для состояний LaO: $X^2\Sigma^+$, $A^1^2\Delta_r$, $A^2\Pi_r$, $B^2\Sigma^+$ и $C^2\Pi_r$. Библ. 20. М. Т.

017мск 11508

Ф.1981.Н7

1980

LaO

94: 73974w The spectrum of lanthanum oxide: a reanalysis of the rotational data. Bernard, A.; Sibai, A. M. (Obs. Lyon, Univ. Claude Bernard, Saint-Genis Laval, Fr.). *Z. Naturforsch.*, A 1980, 35A(12), 1313-16 (Eng). A consistent set of improved rotational consts. is derived for the $X^2\Sigma^+$, $A'^2\Delta_r$, $A^2\Pi_r$, $B^2\Sigma^+$, and $C^2\Pi_r$ electronic states of LaO from the reanal. of all available data. These consts. are obtained from a global fit of the resp. bands by a direct approach technique using complete Hamiltonian matrixes for the description of Π and Δ states. In order to fit the lines accurately, it is necessary to include centrifugal distortion effects in the spin-orbit interactions (A_J , A_J and A_{JJ} resp. in A' , and A and C states) as well as in Λ -doubling (pJ , pJJ , J in C state) and spin-rotation interactions (γJ in B state). More reliable values for the internal partition function and dissoen. equil. const. of LaO are computed for temps. between 1000 and 8000 K, by taking account of all the known electronic states and using present or recent values for the mol. parameters and dissoen. energy.

min.

ammuck 11508

C.A. 1981. 94. N10

LaO



(71)

Сy.и.и.г

Kp

no 66470.211.

1000 - 8000 K.

1980

LaO

PtH

FeCl

молекуляр.
спектры.

(+2)

2-1981/10

10 Б137. Молекулярные спектры поглощения солей бериллия, церия, лантана, железа и платины. Dai-
doji H. «Бунко кэнкю, Bunko konkyu. J. Spectroscop.
Soc. Jap.», 1980, 29, № 5, 326—331 (япон.; рез. англ.)

Изучены молек. спектры в области 200—400 нм ряда солей Be, Ce, La, Fe и Pt в воздушно-ацетиленовом пламени. В кач-ве источников света использованы дейтериевая лампа, самодельная лампа непрерывного излучения и ряд ламп с полым катодом. Спектры получены на атомно-адсорбционном спектрометре «Хитачи—207». Получен ряд спектров молек. поглощения соединений Ce, La и Pt, а также спектры Be(OH)₂, LaO, PtH, и FeCl. Наличие этих полос поглощения может приводить к ошибкам в определении указанных элементов методом атомной адсорбции, достигающим величины в 15 раз превышающей максим. чувствительность определения. Полосы соединений Fe могут также создавать помехи при определении Zn, Cd, Ni, Cu и Cr. С. С. Букалов

LaO

1981

96:190008m Computation of intensities of $B^2\Sigma-X^4\Sigma$ and $C^3\pi-X^3\pi$ band systems of lanthanum oxide (LaO) and titanium oxide (TiO), molecules of astrophysical importance. Dongre, M. B. (Dep. Phys., Shivaji Univ., Kolhapur, 416 004 India). *J. Shivaji Univ.: Sci.* 1978 (Pub. 1981). 18, 37-40 (Eng). Intensities of vibrational spectra of electronic bands of $B^2\Sigma-X^4\Sigma$ and $C^3\pi-X^3\pi$ systems of LaO and TiO were evaluated taking into account elec. anharmonicity corrections. The results are compared with the intensities predicted on the basis of a pure Condon parabola.

लेखक

६

म. चक्रपते

(1) TiO



P.A. 1982, 96, N22

CaO

1981

Nicholls R. W.

фрактора

Astrophys. J., Suppl.

Франка-

Ser. 1981, 47 (3),

Комсомо

279-290.

(см. CaO; III)

daO

Commerce 12761. 1981

Yournés C., et al.

(A.P.)

High Temp. - High Pres-
sures, 1981, 13, N1,
105-111.

●
(see. UOx ; III)

LaO

(Ommuck 13841)

1981

Nicholls R. W.

Факторы
Крамка-
Кенедора

Astrophys. J. Suppl.

ser., 1981, 47, N3,

● 279-290.

Lad

[Dmmuck 14299] 1982

M. N.,
XIII.
26236.

Arco R., Robinson E. A.,
J. Phys. Chem., 1982;
86, 26, 894-899.

lad


Ummleck 14948

1982

Электрон.
струк-
тур

Field R.W.,

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



Lad

[Om. 20391]

1983

Sassenberg U.,

Inaugural dissertation,
Institute of Physics,
University of Stockholm
S-113 46 Stockholm,
1983.

u.n.,
Ođzop

had

lom. 16924

1983

Szőke S., Rajulu A.V.,
et al.

meop.
pazem.

Acta chim. hung., 1983,
113, N1, 35-39.

LaO

[Om. 19228]

1984

Goodfriend P.L.,

Spectrochim. acta;
1984, A40, N 3, 283-

285. ●

(We, обзорка)

LaO

1985

' 102: 157194p Integrated intensities and the band strengths of the C-X system of lanthanum oxide (LaO). Prahlad, U. D.; Bapat, N. S.; Murthy, N. Sreedhara (Dep. Phys., Univ. Mysore, Mysore, 750 006 India). *Physica B+C (Amsterdam)* 1985, 128(1), 123-6 (Eng). Relative integrated intensities were measured of the astrophys. interesting $C^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma^+$ and $C^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ band systems of LaO by the technique of photog. photometry. The Franck-Condon factors and r -centroids are compd., the variations of electronic transition moments (R_e) with internuclear sepn. (r) are evaluated and band strengths are presented.

$C^2\Pi-X^2\Sigma$,
интенсивн.,
факторы ф. К.

C. A. 1985, 102, N 18

LaO

1985

8 J149. Интегральные интенсивности и силы полос в системе C—X молекулы LaO. Integrated intensities and the band strengths of the C—X system of LaO. Prahlad U. D., Varat N. S., Sreedhara Murthy N. «Physica», 1985, BC128, № 1, 123—126 (англ.)

С использованием двухпризменного спектрографа с фотографич. регистрацией получены денситограммы участка спектра испускания молекул LaO в области 437—440 нм (система переходов $C^2\Pi_{3/2,1/2}-X^2\Sigma^+$). По эксперим. данным рассчитаны факторы Франка—Кондона, r — центроиды, а также зависимости моментов электронных переходов от межъядерного расстояния. Молекула относится к числу астрофизич. объектов, т. к. ее присутствие обнаружено в звездах типа S и солнечных пятнах.

М. Т.

спектр,
м.п.

ср. 1985, 18, N 8

LaO

1985

16 Б1163. Интегральные интенсивности и силы полос системы C—X LaO. Integrated intensities and the band strengths of the C—X system of LaO. Prahla-lad U. D., Barat N. S., Sreedhara Murthy N. «Physica», 1985, BC128, № 1, 123—126 (англ.)

Методом фотографич. фотометрии измерены относит. интегральные интенсивности полос секвенции $\Delta v = 0$ ($v = 0-6$) систем $C^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma^+$ и $C^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ молекулы LaO. Спектр испускания возбуждался в дуге постоянного тока. При расчете факторов Франка—Кондона ($q_{v',v''}$) и r -центроид ($r_{v',v''}$) использовался модельный потенциал Морзе и процедура численного интегрирования. Для указанных полос приведены: положение, относит. интенсивности ($I_{v',v''}/I_{00}$), значения $q_{v',v''}$ и $r_{v',v''}$, относит. силы полос ($f_{v',v''}/f_{00}$). Приведены след. выражения, описывающие зависимость электронных моментов перехода (R_e) от r : система

М. А.

X. 1985, 19, N 16

$$C^2\Pi_{3/2} - X^2\Sigma^+ - R_e =$$

$$= \text{const} (1 - 1,0757074r + 0,28913332r^2),$$

$$1,8306 \leq r \leq 1,8669\text{A};$$

система

$$C^2\Pi_{1/2} - X^2\Sigma^+ - R_e =$$

$$= \text{const} (1 - 1,0845493r + 0,29377098r^2),$$

$$1,8306 \leq r \leq 1,8669\text{A}.$$

В. М. Ковба



LaO. Спектр. 22070

1985

2 Л248. Колебательные константы системы B—X LaO, найденные через вращательные данные. Vibrational constants of the B—X system of LaO using rotational data. Suarez Carlos B. «Spectrosc. Lett.», 1985, 18, № 7, 507—510 (англ.)

Выполнен анализ изученных ранее колебательно-вращательных полос 1—0, 0—0 и 0—1 электронного перехода B—X молекулы LaO с помощью процедуры, предложенной ранее в работе (Jenkins F. A., McKellar A. «Phys. Rev.», 1932, 42, 464). Несмотря на незначительное кол-во изученных колебательных полос, использованный метод позволяет найти константы ω_e , $x_e\omega_e$, B_e и α_e . Сравнение с литературными данными и расчет величин D_v подтверждает справедливость метода.

М. В. Т.

М. П.

сп. 1986, 18, № 2

LaO

Olé. Mayo

1985

103: 112566r Vibrational constants of the B-X system of lanthanum oxide (LaO) using rotational data. Suarez, Carlos B. (Dep. Fis., Univ. Nac. La Plata, 1900 La Plata, Argent.). *Spectrosc. Lett.* 1985, 18(7), 507-10 (Eng). The procedures of F. A. Jenkins and A. McKellar (1932) and C. L. Pekeris (1934) were used on data from L. Åkerland (1962) to obtain, from the 1-0, 0-0, and 0-1 bands of the B-X system of LaO, the ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , α_e , $\Delta G_{1,2}$ of the B and X states. The ω_e values are compared to previously reported measurements. Centrifugal distortion consts., D_v , were calcd. from these consts. and also compared with previously measured and calcd. values. All values are in good agreement with previously published work.

(B-X, m.n.)

C. A. 1985, 103, N14.

LaO

Ст. 22070

1985

3 Б1139. Колебательные постоянные системы B—X молекулы LaO, полученные с использованием данных по вращательным постоянным. Vibrational constants of the B—X system of LaO using rotational data. Suarez Carlos B. «Spectrosc. Lett.», 1985, 18, № 7, 507—510 (англ.)

С целью нахождения улучшенного набора колебат. постоянных для системы B—X молекулы LaO выполнена совместная обработка данных по вращат. постоянным и началам полос, полученных из анализа вращат. структуры электронно-колебат. спектров с использованием ф-лы Пекериса, связывающей колебат. и вращат. постоянные. Получены след. значения ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , α_e , $\Delta G_{1/2}$ (в см^{-1}): состояние X 817,23; 2,24; 0,3526; 0,00139; 812,74; состояние B 735,71; 2,65; 0,3414; 0,00170; 730,40; $T_e = 17837,80 \text{ см}^{-1}$. Вычислены и сопоставлены с эксперим. данными параметры центробежного искажения. В. М. Ковба

М.П.

X. 1986, 19, №3

LaO

Ош. 25682

1986

Б Б1247. Лазерная и радиочастотная спектроскопия высокого разрешения спин-вращательного и сверхтонкого взаимодействий в состояниях $X^2\Sigma^+$ и $B^2\Sigma^+$ LaO. High-precision laser and RF spectroscopy of the spin-rotation and HFS interactions in the $X^2\Sigma^+$ and $B^2\Sigma^+$ states of LaO. Childs W. J., Goodman G. L., Goodman L. S., Young L. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 119, № 1, 166—180 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

(М.П.)

Методами спектроскопии лазерной флуоресценции и лазерного радиочастотного двойного резонанса в молек. пучке исследованы спин-вращательные и СТ взаимодействия в состояниях $B^2\Sigma^+(v=0-3)$ и $X^2\Sigma^+(v=0-4)$ молекулы LaO. Параметры спин-вращательного взаимодействия (γ), контактного дипольного СТ (b) и диполь-дипольного СТ (c) взаимодействий, ядерного спин-вращательного взаимодействия (C_I) и эл.

X. 1987, 19, № 6

квадрупольного СТ взаимодействия (eqQ) представлены в виде разложений Данхемовского типа, $X(v, N) = \sum_{i,j} X_{ij} (v+1/2)^i [N(N+1)]^j$. Значения параметров γ_{00} ,

b_{00} , c_{00} , eqQ_{00} , γ_{10} , b_{10} , c_{10} , eqQ_{10} и других (МГц): состояние $B^2\Sigma^+$ — -7574,2; 586,7; 199,2; -193,4; -41,8; -10,3; -14,1; -6,5; состояние $X^2\Sigma^+$ — 66,0065; 3630,63; 94,416; -84,419; 0,3714; 2,54; 0,612; 0,170, $C_{100} = 0,014444$, $\gamma_{01} = -4,400 \cdot 10^{-4}$, $b_{01} = 8,0 \cdot 10^{-4}$, $c_{01} = 1,875 \cdot 10^{-4}$, $eqQ_{01} = -4,43 \cdot 10^{-4}$, $\gamma_{11} = 6,20 \cdot 10^{-6}$, $\gamma_{02} = 1,33 \cdot 10^{-9}$, $\gamma_{20} = 1,986 \cdot 10^{-2}$. Сопоставлены значения γ и «приведенных» параметров СТС b/g_I , c/g_I , eqQ/Q для молекул $^{137}\text{Ba}^{19}\text{F}$ и $^{39}\text{La}^{16}\text{O}$ в состоянии $X^2\Sigma^+(v=0)$.

В. М. Ковба

LaO

DM. 25682

1986

3 Л392. Высокоточная лазерная и радиочастотная спектроскопия спин-вращательных и сверхтонких взаимодействий LaO в состояниях $X^2\Sigma^+$ и $B^2\Sigma^+$. High-precision laser and RF spectroscopy of the spin-rotation and HFS interactions in the $X^2\Sigma^+$ and $B^2\Sigma^+$ states of LaO. Childs W. J., Goodman G. L., Goodman L. S., Young L. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 119, № 1, 166—180 (англ.)
Место хранения ГПНТБ СССР

(М.П.)

Получены спектры возбужденной лазером на красителе флуоресценции молекул LaO в молекулярном пучке в условиях наблюдения, исключающих доплеровское уширение. Для уменьшения зеемановского расщепления в магн. поле Земли последнее экранировалось. Достигнутое разрешение 15—20 МГц позволило наблюдать сверхтонкую структуру вращательных линий колебательной полосы 1—0 электронного перехода $B^2\Sigma^+ \leftrightarrow X^2\Sigma^+$. Выполнены опыты по двойному оптич. РЧ-резонансу с лазерной накачкой компонентов сверхтонкой структуры, позволившие измерить величины расщеплений с точ-

ф. 1987, 18, № 3

ностью ~ 1 кГц. Приведены величины расщеплений. Определены параметры спин-вращательных, контактных дипольных, сверхтонких дипольных, ядерных спин-вращательных и электрических квадрупольных взаимодействий в основном и возбужденном электронных состояниях $^{139}\text{La}^{16}\text{O}$.

М. В. Т.



Lad

(Om. 25682) 1986

105: 123387a High-precision laser and rf spectroscopy of the spin-rotation and hfs interactions in the $X^2\Sigma^+$ and $B^2\Sigma^+$ states of lanthanum monoxide. Childs, W. J.; Goodman, G. L.; Goodman, L. S.; Young, L. (Argonne Natl. Lab., Argonne, IL, 60439 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 119(1), 166-80 (Eng). The spin-rotation and hyperfine interactions in the $X^2\Sigma^+$ and $B^2\Sigma^+$ electronic states of $^{139}\text{La}^{16}\text{O}$ were studied by using Doppler-free laser-induced fluorescence and mol.-beam laser-rf (radiofrequency) ODR. Observations were made for several values of v and many values of N , allowing evaluation of the principal interaction strengths and their N and v dependences for both the X and B states. The results were compared with earlier results for the isoelectronic system $^{137}\text{Ba}^{19}\text{F}$.

($X^2\Sigma^+$, $B^2\Sigma^+$)

лазер. спект.
расс. спектр

e. A. 1986, 105, N 14

LAD

1987

Bellary V. R., Balasubramanian T. K.

$2\Sigma - 4\Sigma$

J. Quant. Spectrosc. and
Radiat. Transfer, 1987,
37, N4, 359-360.

(cur. SecO; iii)


LaO

1988

Carette P., Mocquet A.

Mol. Spectrosc. 1988.

M. N. 131, N 2, C. 301-324.

(cur.  EuO; III)

LaO

О.М. Зорич

1988

4 Л167. Микроволновый вращательный спектр $X^2\Sigma$ LaO. The microwave rotational spectrum of $X^2\Sigma$ LaO / Törring T., Zimmermann K., Hoefl J. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 151, № 6.— С. 520—525.— Англ.

Измерен 81 переход в МВ-спектре поглощения LaO в диапазоне частот 84—275 ГГц. Для основного состояния $X^2\Sigma^+$ определены молекулярные константы, хорошо согласующиеся с предыдущими данными, но имеющие точность на два порядка лучше. Вычислены также константы тонкого и сверхтонкого взаимодействий. По величине интенсивности МВ-излучения, необходимой для насыщения переходов, оценено значение дипольного момента, которое оказалось удивительно малым $\mu = 2$ ед. Дебая. Б. С. Д.

М.А.

ср. 1989, № 4

LaO

ОМ. 20747 1988
8 Б1313. Микроволновый вращательный спектр LaO в состоянии $X^2\Sigma$. The microwave rotational spectrum of $X^2\Sigma$ LaO / Törning T., Zimmermann K., Hoefl J. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 151, № 6.— С. 520—525.— Англ.

В интервале 84—275 ГГц измерен микроволновый спектр поглощения молекул $\text{LaO}(X^2\Sigma, v=0, 1, 2)$ в газовой фазе. Испарялась смесь жидк. лантана и тв. La_2O_3 при т-ре $\sim 2000^\circ\text{C}$. Значения параметров Данхе-ма и др. молек. параметров для $^{139}\text{La}^{16}\text{O}$: $Y_{01} = 10568,285$ МГц, $Y_{11} = -42,680$ МГц, $Y_{21} = -89,1$ кГц, $Y_{02} = -7,872$ кГц, $Y_{12} = 0,007$ кГц, $B_e = 0,3525318$ cm^{-1} , $\alpha_e = 1,4237 \cdot 10^{-3}$ cm^{-1} , $D = 2,623 \cdot 10^{-7}$ cm^{-1} , $R_e = 1,825911$ А, $\omega_e = 816,91$ cm^{-1} , $\omega_e x_e = 2,134$ cm^{-1} . Параметры потенциальной ф-ции Данхе-ма: $a_0 = 473\,265$ cm^{-1} , $a_1 = -2,5598$, $a_2 = 4,16$, $a_3 = -7,22$. Значения констант тонкой и СТ структуры $^{139}\text{La}^{16}\text{O}$: $\gamma_{00} = 66,00$ Мц, $\gamma_{10} = 0,44$ МГц, $\gamma_{01} = -0,32$ кГц, $b_{00} = 3547$ МГц, $c_{00} = 94,28$ МГц, $c_{10} = 0,69$ МГц, $\text{eq}Q_{00} = -84,80$ МГц, $\text{eq}Q_{10} = 0,85$ МГц, $C_{100} = 19,0$ кГц. По интенсивности спектра оценен верхний предел эл. дипольного момента молекулы LaO, $\mu < 2$ Д.

М.П.

X. 1989, № 8

В. М. Ковба

LaO

om. 30747

1988

109: 239656z The microwave rotational spectrum of X $^2\Sigma$ lanthanum oxide (LaO). Toerring, T.; Zimmermann, K.; Hoefft, J. (Inst. Molekuelphys., Freie Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 151(6), 520-5 (Eng). The microwave absorption spectrum of LaO was obsd. at 84-275 GHz. A precise set of Dunham coeffs. for the X $^2\Sigma^+$ ground state was detd. Fine and hyperfine const. were in agreement with previous data. An upper limit for the elec. dipole moment of $\mu < 2$ D was estd. from the satn. of the transitions.

MB, X $^2\Sigma$;

M.N.

C.A. 1988, 109, N26

Моноксиды La
LaO

1989

8 Д123. Исследование соединений редкоземельных элементов с помощью псевдопотенциала. Pseudopotential study of rare earth compounds / Dolg M., Stoll H., Savin A., Preuss H. // Quantum Chem.: Basic Aspects, Actual Trends: Proc. Int. Workshop, Girona, 13—18 June, 1988.— Amsterdam etc., 1989.— С. 265—273.— Англ.

Описана модель псевдопотенциала в нерелятивистском и квазирелятив. приближениях, в которой частично заполненная 4f-оболочка включается в остов. Расчеты проведены неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО в базисах сгруппированных гауссовых ф-ций с включением поляризационных ф-ций и учетом взаимодействия одно- и двукратно возбужденных конфигураций. Рассчитаны длины связей и энергии диссоциации моноксидов, монофторидов и тригалогенидов La, Eu, Gd, Yb и Lu. Полученные закономерности хорошо согласуются с эксперим. данными. Отмечено, что для получения хороших результатов для конкретных состояний необходимо включение 4f-орбиталей в валентную оболочку.

В. Л. Лебедев

М.П.

44

фр. 1990, № 8

Lad

(OM 32512)

1989

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

spectrochimica Acta Golden
Jubilee symposium June
27-28, 1989.

Si

spectroscopy Beyond
Molecular Constants.

LaO

Am 33745

1990

19 Б1180. Ультрафиолетовый спектр испускания LaO. The ultraviolet emission spectrum of LaO / Carrette P. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 140, № 2.— С. 269—279.— Англ.

С высоким разрешением сфотографирован УФ-спектр испускания молекулы LaO в области 344—372 нм. Использовался дуговой разрядный источник с лантановым Э, через к-рый пропускалась смесь аргона и кислорода (1:1). Наблюдали две системы полос $F^2\Sigma^+$.

М.А.

X. 1990, N 19.

Ютрон
320

$(v' = 0-4) \rightarrow X^2\Sigma^+(v'' = 0-3)$ ($\Delta v = 0+1$) и $D_2\Sigma^+(v' = 0-4) \rightarrow X^2\Sigma^+(v'' = 0-3)$ ($\Delta v = 0, +1$). Приведены таблицы Деландра для кантов полос обеих систем. Измерена и проанализирована вращат. структура полос 0-0 и 0-1 системы $F-X$ и полоса 0-0 системы $D-X$ (дано положение и отнесение линий) и получены след. значения молек. постоянных (в см^{-1}): состояние $F^2\Sigma^+ - T_0 = 28049,01$, $B_0 = 0,36121$, $\gamma_0 = 0,058$, $D_0 = 2,5 \cdot 10^{-7}$; $T_1 = 28901,55$, $B_1 = 0,3606$, $\gamma_1 = 0,056$, $D_1 = 2,5 \cdot 10^{-7}$; состояние $D^2\Sigma^+ - T_0 = 26958,96$, $B_0 = 0,36559$, $\gamma_0 = -0,0089$, $D_0 = 2,62 \cdot 10^{-7}$. Оба возбужденных электронных состояния проявляют характерные особенности $b_{\nu J}$ схемы взаимодействия. Для подтверждения этого выполнены расчеты в рамках многоконфигурационной теории поля лигандов (подробно теория изложена в работе // J. Mol. Spectrosc.— 1988.— 131.— С. 301), к-рые показали, что основные вклады в состояниях $F^2\Sigma$ и $D^2\Sigma^+$ связаны соотв. с $8s$ и $7s$ электронами лантана. Рассчитанные энергии состояний равны соотв. 28 666 и 25 462 см^{-1} .

В. М. Ковба

LaO

Am 33745

1990

112: 225888b The ultraviolet emission spectrum of lanthanum monoxide. Carette, P. (Lab. Spectrosc. Mol., Univ. Lille Flandres Artois, 59655 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 140(2), 269-79 (Eng). The UV emission spectrum of LaO, obtained under improved exptl. conditions, was reexamd. The high-resoln. rotational anal. of the 0, 0 and 0, 1 $F^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ and 0, 0 $D^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ bands shows that the 2 excited electronic states $F^2\Sigma^+$ and $D^2\Sigma^+$ exhibit characteristic features of a b₂ coupling scheme. A ligand field multiconfigurational calcn. shows that these states arise mainly from the 7s and 8s configurations and gives theor. support to the obsd. coupling case.

$F^2\Sigma - X^2\Sigma$,

$D^2\Sigma - X^2\Sigma$,

M.N.

C.A. 1990, 112, N 24



Lad (34822 | om. 33075 | 1990

Suerram R.A., Lovas F.F.,
et al.,

вращам. J. Chem. Phys., 1990, 92(8),
пример, 4724-4733.

M Pulsed-nozzle Fouriertrans-
form microwave spectroscopy

of laser-vaporized metal
oxides: Rotational spectra
and electric dipole moments
of YO, LaO, ZnO and H₂O.



Lad

Am. 36421

1991

CTA-X25

Behere S.M., Bhartiya J.B.,

J. Phys. B. 1991, 24,
N21, 4505-4508

Intensity \bullet measurements
and relative band strengths

of the C-X system of Lab.

Lad

1992

Bhartiya J.B.; Behere S.H.,

Acta Phys. Slovaca 1992,

42 (5), 274-8.

(D₀⁰)

(iii. ICD;  III)

LaD

Om. 37 457

1992

Kotzian M., Rösch N., et al.,

Theor. Chim. Acta, 1992,

81, 201-222.

Intermediate neglect differential spectroscopic
overlap (minko 1-are comp.)
studies on lanthanide complexes

LaO

1993

118: 222146w, Intensity and vibrational temperature measurements of bands of the D-X and F-X system of lanthanum monoxide. Behere, S. H.; Bhartiya, J. B. (Dep. Phys., Marathwada Univ., Aurangabad, 431 004 India). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1993, 49(4), 449-51 (Eng). The UV spectrum of LaO has been photographed with a 10.6 m concave grating spectrograph. Intensities of bands of the 1-0 sequence of the $D^2\Sigma-X^2\Sigma$ system and 0-0 sequence of the $F^2\Sigma-X^2\Sigma$ system were measured. FC factors, r -centroids and effective vibrational temps. were calcd. Variations of the electronic transition moments with internuclear sepn. have been studied. Band strengths are reported.

$D^2\Sigma-X^2\Sigma$,

$F^2\Sigma-X^2\Sigma$

intensity. μ
const. t_0

C.A. 1993, 118, N22

LaO

1994

120: 119829p Measurements of the radiative lifetimes of the $v = 0$ levels of the $B^2\Sigma^+$ and $C^2\Pi$ states of lanthanum oxide (LaO). Carette, P.; Bencheikh, M. (Lab. Dyn. Mol. Photon., Univ. Lille I, 59655 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 163(1), 309-12 (Eng). New detns. of the radiative lifetimes of the $B^2\Sigma^+$ and $C^2\Pi$ states of LaO are reported. Discrepancies between the present data and those presented by K. Lui and J. M. Parson (*J. Chem. Phys.* 1977, 67, 1814) are discussed.

($B^2\Sigma^+$, $C^2\Pi$,
 τ)

C.A. 1994, 120, N10

Lad

(OM-37890)

1994

Lad+

Marquez A., Maria José

cremacker. Capitan et al.,
cb - 8a,

romeres. Int. J. Quantem. Chem.,
Kauthe 1994, 52, 1329-1338,
Fuyneal.
ALEM. CEM,
ab ineto paul

1995

Om 38541

F: LaO

P: 3

4B142. Электронное строение LaO. Сопоставление данных теории поля лигандов и неэмпирических расчетов. The electronic structure of LaO: Ligand field versus ab initio calculations / Schamps Joel, Bencheikh Mohammed, Barthelat Jean-Claude, Field Robert W. // J. Chem. Phys. - 1995. - 103, N 18. - С. 8004-8013. - Англ.



РЖХ 1997

LaO

of 38541

1995

4Б142. Электронное строение LaO. Сопоставление данных теории поля лигандов и неэмпирических расчетов. The electronic structure of LaO: Ligand field versus ab initio calculations / Schamps Joël, Bencheikh Mohammed, Barthelat Jean-Claude, Field Robert W. // J. Chem. Phys. — 1995 — 103 , № 18 — С. 8004—8013 — Англ.

М.А.

X. 1996, N 4.

LaO

1995

6 Б173. Расчеты оксидов лантаноидов методом функционала плотности. Density functional calculations of lanthanide oxides / Wang S. G., Pan D. K., Schwarz W. H. E. // J. Chem. Phys. — 1995. — 102, № 23. — С. 9296—9308. — Англ.

Методом функционала плотности в трех вариантах — в приближении $X\alpha$, с частичным учетом электронной корреляции и с полным учетом градиентной поправки рассчитаны LaO , EuO , GdO , YbO и YbF . Методом ССП Дирака учтены релятивистские поправки. Подробно проанализировано влияние расчетного приближения на длины связей, энергии связи, колебательные частоты и распределения электронной плотности. Показано, что лучшим приближением для описания зарядового распределения является структура X^+O^- . Библ. 70. Н. Л.

М.А.

☒ (74)

X.1996, №6

1995

F: LaO

P: 3

6B173. Расчеты оксидов лантаноидов методом функционала плотности
Density functional calculations of lanthanide oxides / Wang S. G., Pan D. K.
Schwarz W. H. E. // J. Chem. Phys. - 1995. - 102, N 23. - С. 9296-9308. - Англ.
Методом функционала плотности в трех вариантах - в приближении
Х'альфа', с частичным учетом электронной корреляции и с полным учетом
градиентной поправки рассчитаны LaO, EuO, GdO, YbO и YbF. Методом
ССП Дирака учтены релятивистские поправки. Подробно
проанализировано влияние расчетного приближения на длины связей,
энергии связи, колебательные частоты и распределения электронной
плотности. Показано, что лучшим приближением для описания
зарядового распределения является структура $X^{+}O^{-}$. Библ. 70.

Р. Ж. Х. №6, 1996

Lad

[OM-37848]

1995

Re, Re Wang S.F., Schwarz W.H.E.,
J. Phys. Chem., 1995, 99, N30,
11687 - 11695.

Lanthanide Diatomics and Lanthanide
Contraction ●

Lad

Om 39221 Kuechlekois 1997

ab initio
pavem

127: 239290x Ab Initio Study of the Lanthanide and Actinide Contraction. Kuechle, W.; Dolg, M.; Stoll, H. (Max-Planck-Institut fuer Physik Komplexer Systeme, D-01187 Dresden, Germany). *J. Phys. Chem. A* 1997, 101(38), 7128-7133 (Eng), American Chemical Society. Results for the spectroscopic consts. of the monohydrides, monoxides, and monofluorides of the lanthanide elements lanthanum and lutetium as well as the actinide elements actinium and lawrencium from all-electron and valence-only ab initio electronic structure calcns. are presented. The valence-only investigations were carried out using energy-consistent pseudopotentials for the heavy atoms. Electron correlation was accounted for by means of the coupled-cluster method. Multireference averaged coupled-pair functional calcns. were carried out to describe effects due to the mixing of the energetic close-lying $ns^{2-m}(n-1)d^m$ ($0 \leq m \leq 2$) configurations of the lanthanide ($n = 6$) and actinide ($n = 7$) cations. The counterpoise correction was applied to est. the size of the basis set superposition errors. Nonrelativistic as well as quasirelativistic calcns. were performed. The latter included also corrections for spin-orbit effects for the actinide compds. derived from limited CI calcns. The reliability of the pseudopotential approach is demonstrated by a comparison to the results of corresponding nonrelativistic

711



C.A. 1997, 127, N 17

Li₂, AcO, H₂O,

and scalar-relativistic Douglas-Kroll-Hess all-electron self-consistent-field calcns. performed with large basis sets. The influence of shell-structure effects, i.e. the filling of the 4f and 5f shell, and relativistic effects on the mol. properties is discussed. The values for the lanthanide and actinide contractions are found to depend strongly on the ligand and to vary from 6 to 11 pm for lanthanides and from 11 to 17 pm for actinides. Relativistic effects play a significant role; for example, their neglect even leads to a slight lanthanide/actinide expansion in the case of the monoxides.

Lanth, Lanth, ActH, LrH,
LanF, Lanth, Act, LrF



LaO
LaO_n⁻

R. Klingelez, G. Lüttgens, N. Pontius,
R. Rochow, P. S. Bechtold, M. Neeb
and W. Eberhardt

1999

Eur. Phys. J. D 9, 263-267

Photoelectron spectra of small LaO_n⁻
clusters: decreasing electron affinity
upon increasing the number of oxygen atoms

420/0

Lad

(om. 40131)

1999

Lad⁺

Lester Andrews⁺, Mingpei Zhu
and George V. Chertihin,

UK

Секция,
констан-
тамент,
группа
УФМ

J. Phys. Chem. . A1999, 103,
N33, 8525-32.



LAD

(Dm. 39899)

2 ? 1979

M.N.

Bernard A.; Vergès J.,

The Infrared $A^{2}P \rightarrow A'^{2}D$
Transition of LAD.

CRAD - Observatoire astronomique
de Lyon, 69561 Saint-

Genis - Laval cedex, France;
and ² Laboratoire Bimé Cotton,
CNRS II, 91405 Orsay, France

(Merrymem)



Ortuet 40092

1999

F: LaO

P: 3

132:99856 Laser-excited fluorescence spectra of lanthanum monoxide. The B2.SIGMA.+ .fwdarw. X2.SIGMA.+ system. Bernard, A.; Taher, F.; Topouzkhaniyan, A.; Wannous, G. Astrophys., Suppl. Ser., 139(1), 163-166 (English) 1999

Fluorescence spectra of LaO excited by selected Ar+ and Kr+ laser lines were analyzed by Fourier transform spectrometry. Rotational levels in the B2.SIGMA.+ ($v = 2, 3, 4$) electronic state were populated either directly or after collisional relaxation, inducing many fluorescence transitions to

C.H. 2000, 132

the ground state $X^2\Sigma^+$ ($v = 1-5$). Under our exptl. conditions, bands of the $\Delta v = 0$ sequence of the B.fwdarw.X system also appear, fairly developed. A global treatment of the wavenumbers of some 830 lines in 9 bands of the system, involving the levels $v' = 0$ to 4 and $v'' = 0$ to 5, is carried out. The consistent set of accurate effective spectroscopic consts. for both electronic states, directly obtained at equil., is expected to be useful for high resoln. syntheses of S-type stellar spectra.

LaO

[Om 41269]

2000

Bernard A., Vergés J.,

M. N. J. Mol. Spectrosc., 2000,
201, 172-174.

The Infrared $\nu_{27} \rightarrow A^2$ Tran-
sition of La \bullet O.

of. 41263

[of. 39899] ~~france~~ 2000

F: LaO

P: 3

132:285609

The Infrared A2.PI. A' 2.DELTA.
Transition of LaO. Bernard, A.; Verges, J.

CRAL-Observatoire Astronomique de Lyon
Saint-Genis-Laval 69561, Fr. J.

Spectrosc., 201(1), 172-174 (English) Mol. 2000

The authors report the first observation of the A2.PI.-A' 2.DELTA. emission system of lanthanum monoxide which extends in the IR spectral region, from 5100 to 5500 cm⁻¹. Rotational analyses of the 0-0, 1-1, 2-2, and 3-3 bands recorded at high resolu. were carried out.

LaO

C.A. 2000

F: LaO

2000

P: 3

132:257588 Ionization mechanisms of LaO molecules in low temperature flame. Gorbatenko, A. A.; Voronina, R. D.; Zorov, N. B.; Revina, E. I. Kafedra Lazernoi Khim., MGU Moscow, Russia Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim., 41(1), 32-33 (Russian) 2000

The ionization mechanism for the LaO mols. in the low temp. flame in gas-air at uni- and two-step excitation was studied. The collisional ionization was responsible for the results.

C.A. 2000

F: LaO+

P: 3

cm. 40627

2000

133:340601 LaO+: A Diatomic Cation with a Sizable Proton Affinity upon Generation of the LaOH₂⁺ Dication.

Schroeder, Detlef; Schwarz, Helmut; Harvey, Jeremy N. Institut fuer Organische Chemie, Technischen Universitaet Berlin Berlin D-10623, Germany J. Phys. Chem. A, 104(48), 11257-11260 (English)

2000 Charge stripping of the monocationic counterparts allows for the generation of the dicationic species LaO₂⁺ and LaOH₂⁺ by mass spectrometric means. Energy-resolved measurements establish vertical ionization energies of $IEv(LaO^+) = 16.0 \pm 0.3$ eV and $IEv(LaOH^+) = 10.8 \pm 0.3$ eV. These figures are in reasonable agreement with $IEv(LaO^+) = 15.62$ eV and

IEv(LaOH+) = 10.61 eV predicted by ab initio calcns. using the CCSD(T) approach. Further, the calcd. properties can be used to convert the exptl. IEv values to adiabatic values, i.e., IEa(LaO+) = 15.2 +/- 0.4 eV and IEa(LaOH+), = 10.8 +/- 0.4 eV. Evaluation of the dication energetics in terms of Born-Haber cycles reveals that the diat. LaO+ monocation has a proton affinity (PA) similar to that of methane. Accordingly, reactions of LaO+ with strong Bronsted acids AH+ could provide a route for the generation of gaseous dications in cation/cation reactions. However, for the exothermic model reaction LaO+ + NeH+ .fwdarw. LaOH2+ + Ne, CCSD(T) calcns. predict a sizable barrier of about 38 kcal mol⁻¹ eV⁻¹ due to Coulomb repulsion of the monocationic reactants.


MO
M = La, Lu,
Ac, U, Lr

LAD

[08, 40693a]

2001

neopem.
porem 2e,
pempue
pocpe u we

(+11) 



C. N. 2001, 134, N13

134: 183766g A comparison of scalar-relativistic ZORA and DKH density functional schemes: monohydrides, monoxides and monofluorides of La, Lu, Ac and Lr. Hong, G.; Dolg, M.; Li, L. (Department of Chemistry, University of Southern California, Los Angeles, CA 90089-1062 USA). *Chem. Phys. Lett.* 2001, 334(4,5,6), 396-402 (Eng), Elsevier Science B.V. The zeroth-order regular approxn. (ZORA) to the Dirac Hamiltonian and the Douglas-Kroll-Hess Hamiltonian (DKH) in their scalar-relativistic formulation have been implemented in a d. functional code. The two approaches are compared on the same footing, i.e., using the same exchange-correlation functionals, basis sets and grids for numerical integration. The monohydrides, monoxides and monofluorides of La, Lu, Ac and Lr have been selected for a calibration study. Both methods yield very consistent results for bond lengths, binding energies and vibrational constns. Comparison is also made to exptl. data as well as other relativistic all-electron and pseudo-potential results.

Lell, Acl, Ard, Latl, Lull,
Ach, Lrh, dat, Luf, Act,
Art

Lal

(DM. 41146)

2007

Luning Zhang,
Limin Shao et al.,

Chem. Phys., 2007,

272, N1, 27-36

reactions

of

layer-ablated

Y and La atoms with H₂O
Infrared spectra and density
functional calculations of
the HMO, HM(OH) and
M(OH)₂ molecules in solid
argon

Lal 25+

[OM. 41130]

2001

Xiaoyan Lao, Michael Dolg,

Le, De,
We

J. Chem. Phys., 2001, 115,
N 16, 7348 - 7355