

ThO

VII 3118

ThO, TiO, ZrO(Vo, Wo)

Rosen B.

etc. op. K.

10

ThO
 HfO

S.G. Krishnamurthy

1951

Proc. Phys. Soc., London A, 1951, 64, 852

Гидроксиды церия и осмия
 ThO и HfO

9, 17

ThO

Gatherer H., Junker J.,

1957

Salpeter E. W.

Mol. Spectra of Metallic
Oxides (1957) Specola Vaticana

D_0 (Thd)

$\Delta H_s = 136.6$

$D_0 = 196$

~~ΔH_s (Thd) ?~~

Darnell A. Y., McCallum W.A.,
Milne T.A., J. Ph. Ch., 64, 341

1960

Debenne vapor topol

(Cell. Th) I

CA, 54, 16971e

1962

8 Д133. Некоторые новые системы полос молекул ThO, TiO и ZrO. Rosen B. Quelques nouveaux systèmes de bandes des molécules ThO, TiO et ZrO. «Advances. Molec. Spectrosc. Vol. 2». Oxford—London—New York—Paris, Pergamon Press, 1962, 533—534 (франц.)

В красной и ИК-областях спектра обнаружены новые полосы ThO, анализ вращательной структуры которых позволяет сгруппировать большинство из них в три системы со следующими постоянными:

I	II	III
$\nu_{00}=11\,572,8$	12\,706,4	$\begin{cases} 19\,570,9 \\ 19\,538,8 \end{cases}$
$\omega_0=582,2$	751	~ 710
$\omega_0=635,5$	801,5	$\sim 800.$

В спектре TiO в области 6300—5800 Å обнаружены и классифицированы 3 новых системы полос. Для ZrO приведена колебат. структура двух новых систем в областях около 5859,8 и 6498,9 Å. Некоторые из полос наблюдаются только в спектрах звезд класса M.

В. Архангельская

ZrO, TiO,
ThO
спектр

См. также 3118-VIII

(см. TiO)

ф. 1963. 87

$R_0(\text{ThO})$ $R_0(\text{ThO}_2)$ (2 ж.)Энергия
диссоциации

X. 1964. 11

11 Б462. Термодинамическое исследование системы торий — кислород при высоких температурах. Askermann R. J., Rauh E. G., Thorn R. J., Cannon M. C. A thermodynamic study of the thorium-oxygen system at high temperatures. «J. Phys. Chem.», 1963, 67, № 4, 762—769 (англ.)

Эффузионным и масс-спектроскопич. методами исследована система Th — O при 2000—3000° K. Испарение ThO₂ из W-ячейки происходит конгруэнтно. Эффективное давление пара представлено уравнением $\lg p(\text{ат.}) = (8,26 \pm 0,13) - (3,55 \pm 0,03) \cdot 10^4/T$. При длительной экспозиции смеси Th — ThO₂ происходит некоторое растворение Th в ThO₂, в связи с чем затруднительно определить теплоту возгонки ThO по р-ции Th(жидк., $a < 1$) + ThO₂(тв.) = 2ThO(газ); результаты по определению $p(\text{ThO})$ имеют вследствие этого ограниченную точность. Если реализуется закон Рауля, то активность Th равна 0,97, как следует из результатов анализа охлад. смесей. Масс-спектроскопич.

исследование пара показало присутствие ThO и ThO_2 в сравнимых кол-вах. $\Delta H(\text{субл.}) \text{ThO} = 178,5 \pm \pm 2,2 \text{ ккал/моль}$, $\Delta H(\text{субл.}) \text{ThO}_2 = 158,7 \pm 2,5 \text{ ккал/моль}$ (среднее из эффузионных и масс-спектроскопич. измерений). Для р-ции $\text{ThO}_2(\text{тв.}) = \text{ThO}(\text{газ}) + \text{O}(\text{газ})$ $\Delta H = 347,0 \text{ ккал}$ и $\Delta S = 76,9 \text{ энтр. ед.}$ Ионный ток ThO_2^+ при изменении т-ры быстро приходит к равновесному значению, в то время как для достижения постоянного значения ионного тока ThO^+ требуется 20—40 мин., в зависимости от т-ры. С использованием литературных данных рассчитано для р-ции $\text{ThO}_2(\text{тв.}) = \text{ThO}(\text{газ}) + \text{O}(\text{газ})$, $\lg p(\text{ThO})_{at} = 8,70 - 37900/T$ и $\lg p(\text{O})_{at} = 8,10 - 37900/T$. $\lg P(\text{ThO}_2)_{at} = 7,64 - 34400/T$, $\Delta F_f^0 \text{ThO}(\text{газ}) = -10300 - 14,4 T \text{ кал}$ (2000—3000° K), $\Delta F_f^0 \text{ThO}_2(\text{газ}) = -138600 - 11,4 T \text{ кал}$ (2000—3000° K). Энергии диссоциации $D(\text{ThO}) = 8,3 \text{ эв}$ и $D(\text{ThO}_2) = 16,3 \text{ эв}$ при 0° K вычислены с использованием мол. констант и термодинамич. функций. Возможно, что причиной расхождения вычисленных значений S_{ThO} , газ с эксперим. при 2000—3000° K на 3—5 энтр. ед. является существование низколежащих электронных уровней.

Л. Резницкий

ThO_2 , ThO , ZrO_2 , ZrO , HfO
(Vi, L)

VII 865 1963

Linevsky M.J.,

Proc. Meeting Interagency Chem. Rocket
Propulsion Group Thermochem., 1st, New-Jork,
1963, L, 11-20 (1964).

Some recent infrared spectra of thoria,
zirconia, and hafnia by matrix isolation.

J, F

CA., 1965, 62, N3, 2370d

let to D-uc

VIII 1411

1964

ThO (Di, mar. uoc.)

Edvinsson G., Selin L.E.,
Phys. letters, 1964, 9, N3, 238-239

10

Pnch, 1965, 2543

lett opus

ThO

Ex. energy

1964

(25407) THE BAND SPECTRUM OF THORIUM OXIDE.
G. Edvinsson and L.-E. Selin (Univ. of Stockholm). Phys.
Letters, 9: 238-9(Apr. 15, 1964).

The first two bands in a sequence, situated at $\lambda = 7868 \text{ \AA}$ and belonging to a strong system of red-degraded bands, were rotationally analyzed. The bands consist of an R, a Q, and a P branch, each splitting into two components at higher J numbers. (M.J.T.)

NJA-1964-18-15

Th O
(enamp)

1964

Band spectrum of thorium oxide. G. Edvinsson and L. E. Selin (Univ. Stockholm, Swed.). *Phys. Letters* 9(3), 238-9. (1964); cf. Krishnamurty, *CA* 46, 9981e. A rotational analysis of the 1st 2 bands in a sequence, situated at $\lambda = 7868 \text{ \AA}$, indicated that the transition is $\Phi-\Delta$.
BGJN

C. A. 1964 CP 113 2613C

ThO

спектр

✓ 2 Б43. Полосатый спектр окиси тория. Edvins-
son G., Selin L. E. The band spectrum of thorium oxide. «Phys. Letters», 1964, 9, № 3, 238—239 (англ.) 1964

Проведен анализ вращательной структуры первых двух ($\lambda \sim 7868\text{Å}$) отнесенных в длинноволновую сторону полос сильной системы ThO. Обнаружены по одной R-, Q- и P-ветви, причем ветви R и P имели примерно половину интенсивности Q-ветви и на линиях с высокими J -числами ($J \approx 100$) наблюдается расщепление на две компоненты. По аналогии с полосатым спектром TiO и ZrO, исследованные полосы ThO отнесены к переходу $\Delta\Lambda=1$ или $\Phi-\Delta$; мультиплетность состояний не установлена. На основании принципа Франка—Кондона из близости значений B_v сделан вывод о принадлежности полос к последовательности 0,0. Приведены приближенные значения констант (в см^{-1}): $B_v' = 0,3183 - 0,0013(v' + 1/2)$; $B_v'' = 0,3265 - 0,0013(v'' + 1/2)$; $D' \approx D'' \approx 0,2 \cdot 10^{-6}$; $v_{00} = 12693,34$, $v_{11} = 12645,55$. Ф. Ортенберг

х. 1965.2

ThO

полоса-
тый
спектр

1964
V12 Д153. Полосатый спектр окиси тория. Edvins-
son G., Selin L. E. The band spectrum of thorium oxide. «Phys. Letters», 1964, 9, № 3, 238—239 (англ.)

Проведен вращательный анализ первых двух полос ($\lambda \sim 7868 \text{ \AA}$) одной из последовательностей, наблюдаемых в спектре ThO ($\lambda = 3800 - 8500 \text{ \AA}$). По аналогии с полосатым спектром TiO и ZrO, исследованные полосы ThO отнесены к переходу $\Delta\Lambda = 1 \text{ Ф} - \Delta$, причем мультиплетность состояний не установлена. На основании принципа Франка — Кондона из близости значений B_v сделан вывод о принадлежности полос к последовательности 0,0. Приведены приближенные значения констант (в см^{-1}) $B_v' = 0,3183 - 0,0013 (v' + 1/2)$; $B_v'' = 0,3265 - 0,0013 \cdot (v'' + 1/2)$; $D' \sim D'' \simeq 0,2 \cdot 10^{-6}$; $\nu_{00} = 12693,34$, $\nu_{11} = 12645,55$.
Ф. Ортенберг

ф. 1964. 128

ThO

1964
Linersky M. Z.

V_i

Proc. Meeting Interagency
Chem. Rocket Propulsion
Group Thermochem., 1st,
New York, 1963, 1, pp. 11-20.

Хемоинформационные ресурсы
негавно UK - Библиография
аккумуля Th, Zr и Hf ме-

подачи матричной
излучения.

(см. ThO_2) III

VII-5788

1964

ThO, ThO₂, MgF₂, Li₂F₂, ZrO, ZrNa gp.
(Di, alk)

Lienovsky M. J.,

AD 609121, Avail CFSTI, 1964, 61 pp

10, 11

CA, 1965, 63, n4, 3777e

VIII - 1912

126-5

ThO (unrec. voc.)

Selvinsson G., Selvin L.-E.,
Aslund N.,

Arkiv fys, 1915, 30, w 4, 283-319 (unrec.)

On the band spectrum ThO

Phys, 1916, 12 2202

10

cb

VIII - 1412

1965

ThO (mar. uocī.)

Edvinsson G., Selin L.-E., Åslund N.,

Arkiv fys., 1965, 30, 283-319

10

лето опр.

1965

number 866.

Band spectrum of ThO. Gunnar Edvinsson, Lars Erik Selin, and Nils Aslund (Univ. Stockholm). *Arkiv Fysik* 30(22), 283-319(1965)(Eng). The band spectrum of diat. ThO has been studied, 5000-11,000 Å. A high-frequency electrodeless discharge was used as a light source. Photographs were taken in a large plane-grating spectrograph. Th lines were used for comparison. The analyzed bands belong to 7 different band systems. These systems result from transitions between 9 different singlet electronic states, $4^1\Sigma$, $3^1\Pi$, $1^1\Delta$, and $1^1\Phi$ state. The term values have been detd. by a least sqs. method. The rotational consts. have been detd. from these term values. The relative errors in B and D values are about 10^{-5} and 10^{-3} , resp. ω_e , B_e , and ν_{00} are tabulated for 9 states.

C. A. Pinkham

ThO

Chupp
 spectro-
 spectro-
 spectro-

C.A. 1966. 64. 11

15197c

ThO

спектр
мол. ион.

12 Д202. О полосатом спектре ThO. Edvinsson Gunnar, Selin Lars-Erik, Aslund Nils. On the band spectrum of ThO. «Arkiv fys.», 1965, 30, № 4, 283—319 (англ.)

Изучены спектры ThO в области 5000—11 000 Å. Получено семь полос, соответствующих переходам между девятью синглетными электронными состояниями: четыре из них $^1\Sigma$, три $^1\Pi$, одно $^1\Delta$ и одно $^1\Phi$ -состояние. С помощью метода наименьших квадратов рассчитаны значения молекулярных постоянных.

1965

отмечено 866

ф. 1966. 122

1965

ThO

5 Б113. Полосатый спектр ThO. Edvinsson Gunnar, Selin Lars-Erik, Åstund Nils. On the band spectrum of ThO. «Arkiv fys.», 1965, 30, № 4, 283—319 (англ.)

Изучены спектры ThO в области 5000—11 000 Å. Получено 7 полос, соотв-их переходам между 9 синглетными электронными состояниями: четыре из них $^1\Sigma$, три $^1\Pi$, одно $^1\Delta$ и одно $^1\Phi$ -состояние. С помощью метода наименьших квадратов рассчитаны значения вращательных постоянных. Э. Бурхард

м.н.

отмечен 866

х. 1967. 5

ThO

Niels Aslund

1965

928

Inaugural Dissertation.

Chemip

" Experi m. Studies diatom, molec.

1189 ThO

Шукарев С.А., Семенов Т.А.¹⁹⁶⁵

До
Московская
М. Ф.

Исследования в области химии
соединений и окислов. Изд-во
"Наука", Москва-Ленинград, 1965,
с. 208.

Мое-3

До (ThO)

4916a ThO

Ames L.L., Barrow R.F.

1967

W. N.
Munsell

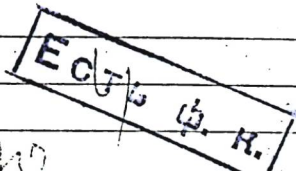
Proc. Phys. Soc., 1967, 90, 869

12

ThO M.K.

8

VIII 907 1968

ThO (4.4.1)Edvinsson G., Bornstedt A.,
Mylen P.Uppsala fys, 1968, 38, n 3, 193-213 (any)
Rotational analysis for a pro-
bed π state in ThO

Bull. 1912 1352

ThO

ВФ-907-111

6 Д188. Вращательный анализ возмущенного состояния $^1\Pi$ молекулы ThO. Edvinsson Gunnar, Bornstedt Anita v., Nylén Per. Rotational analysis for a perturbed $^1\Pi$ state in ThO. «Arkiv fys.», 1968, 38, № 3, 193—218 (англ.)

1968

Подробно изучено новое состояние $^1\Pi$ в молекуле ThO, обозначенное как $I^1\Pi$. Приводится описание эксперимента по изучению системы полос спектра ThO, соответствующих переходам $I^1\Pi-X^1\Sigma$. Проведен вращательный анализ этой системы полос и полосы 2—2 перехода $G^1\Delta-H^1\Phi$. В приложении приведены значения термов соответствующих вращательно-колебательных состояний и волн. числа вращательных линий. Анализ показал, что состояние $I^1\Pi$ возмущено из-за взаимодействия с высшими колебательными уровнями состояния $G^1\Delta$. На основе проведенного анализа исправлено прежнее отнесение полос $^1\Phi-^1\Delta$. Вычислены основные молекулярные постоянные ThO для состояний $I^1\Pi$, $G^1\Delta$ и $H^1\Phi$.

В. А. Морозов

09. 1969. 6 Я

ThO

BQ-907-VIII

1968

15481b Rotational analysis for a perturbed $^1\Pi$ state in thorium oxide. Edvinsson, Gunnar; Bornstedt, Anita V.; Nylen, Per. *Ark. Fys.* 1968, 38(9), 193-218 (Eng). A new $^1\Pi$ state assigned $I^1\Pi$ has been found. Rotational anal. shows the state is perturbed by higher vibrational levels of the previously analyzed $G^1\Delta$ state. Anal. of the perturbation makes it possible to relate the $G^1\Delta$ and $H^1\Phi$ states, previously analyzed, to the state $X^1\Sigma$. Mol. consts. for the $I^1\Pi$, $G^1\Delta$, and $H^1\Phi$ states are given.

G. S. Hammaker

brary.
amenz

C.A. 1969. 70. 4

U-O ; U-N ; UO_2-O ; $\bar{v}_{III} 2003$ 1969
Th-O ; Th-N ; UO_2-N ; (Debye, ΔH_f)

Athavale V.P., Kalyanaraman R.,
Sundaresan M.

Indian J. Chem. 1969, 7(4), 386-91.

Thermochemical studies on some
uranium and thorium compounds

4, 10 / 0 $\bar{v}_{III} 2003$ I. C. A., 1969, 7, 12, 1170e

ThO

1969

Брасс,
Копер,
ноа.

(λ_{298}^0 ; λ_{20}^0)

Too Brener, Lord Woodblatt.
Adv. in High Temp. Chem.
1969, 2, 1-86.

Отмечен 1862

ThO

ommuca 7573

noce

1969

De Maria G.

(Do) 2° simposio Internazio-
nale di dinamica delle
Reazioni chimiche su le
fiamme Quali Reazioni
in flusso

ThO (u.n.) 8 VIII 4307 1970

Bornstedt A. von, Edvinsson G.

Phys. Scr., 1970, 2, n 4-5, 205-210 (a-174).

Rotational analysis of two mutual-
ly interacting electronic states
of 1π character in ThO. Y. I. I. I.

Есть оригинал
ОРИГИНАЛ

Рис. 1971, 82378 10

ThO

Вср - 4307 - VIII

1970

14 Б119. Анализ вращательной структуры двух взаимодействующих электронных состояний типа ${}^1\Pi$ мо-

лекулы ThO. Bornstedt A. von, Edvinsson G. Rotational analysis of two mutually interacting electronic states of ${}^1\Pi$ character in ThO. «Phys. scr.», 1970, 2, № 4—5, 205—210 (англ.)

Исследован эмиссионный спектр молекулы ThO в безэлектродном МВ-разряде. В области 3300—5300 Å найдены 2 новые системы полос, к-рые отнесены к переходам из состояний $K {}^1\Pi$ и $M {}^1\Pi$ в основное состояние $X {}^1\Sigma$. Выполнен анализ ряда полос этих систем и определены значения колебательных и вращательных постоянных. Обнаружено Λ -удвоение уровней K и M с высокими значениями J . И. Р. Алиев

M. N.

X. 1971. 14

ThO

ВФ - 4307 - VIII

1970

8 Д378. Вращательный анализ двух взаимодействующих $^1\Pi$ -состояний в ThO. Bornstedt A. von, Edvinsson G. Rotational analysis of two mutually interacting electronic states of $^1\Pi$ character in ThO. «Phys. scr.», 1970, 2, № 4-5, 205—210 (англ.)

Исследована вращательная структура двух новых систем полос испускания молекулы ThO в области 4260—4620 Å. Полосы отнесены к переходам с двух неизвестных ранее состояний $M^1\Pi$ и $K^1\Pi$ на основное состояние $X^1\Sigma$. Подробно изучено взаимодействие между верхними состояниями M и K . Для новых состояний вычислены величины термов и значения молекулярных констант T_0 , B_e , a_e , ω_{ek} , $\Delta G_{1/2}$. Библ. 14. И. Дворников

ф. 1971. 87

ThO⁺
2128

1970
Dunn T. M., Hanson L. K.,
Robinson K. A.

F.M.N.
Mensch

Canad. J. Phys. 1970, 48, 1657
P.

4

ThO⁺

u. u.

ThO⁺
2462

Green D.W.

1971.

u.n.
Mend

J. Phys. Chem., 1971, 75,
p 3103

7

ThO⁺
u.n.



HfO, ThO [u.n.] 8 7 III 5239 1971
Edvinsson G.

Report, 1971, USIP-71-9, 19 (unw.)

Spectroscopic studies of the diatomic molecules hafnium oxide and thorium oxide.

10

(Φ)

6
CA, 1972, 77, 1112, 81674h

ThO

Edvinson, Gunnar.

1972.

Report 1971, from Nucl. Sci. Abstr.

(u.n.) 1972, 26, N8, 17574

(cur. HfO, III, u.n.)

ThO

1972

22069s Metal oxide studies. Linevsky, Milton J. (Missile Space Div., Gen. Electr. Co., Philadelphia, Pa.). U.S. Nat. Tech. Inform. Serv., AD Rep. 1972, No. 746687, 30 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Govt. Rep. Announce. (U.S.) 1972, 72(19), 49. Emission and absorption spectra over mixts. of liq. U- UO_2 were obtained by using the carbon-tube furnace facility. In the temp. range of ~ 2100 – 2400 a complex system of bands was obsd. in the region of 4800 – $7000 \text{ \AA}$. The wavelength region from 5900 – $6000 \text{ \AA}$. was esp. noteworthy since it contained a very intense highly dense band system. By comparison with the temp. coeff. of a known U line it was shown that the most intense feature in this region was due to either UO or UO_2 . Flame studies were initiated by using UF_6 seeded into $(\text{CN})_2/\text{O}_2$ and $\text{H}_2/\text{N}_2\text{O}$ flames. Spectra of these flames were obsd. and were completely different in nature from the furnace results. The oscillator strength of the (0,0) and the (1,1) band of the $E'\Sigma-X'\Sigma$ transition in ThO was obtained.

(f m n)

C. A. 1973. 78. 24.

TiO; HfO; ThO; SeF; ZrO; UO (E; чужеродн) 1572
viii 5315

Wentink T. Jr., Spindler R. J., Jr.

38/2
J. Quant. Spectrosc. and Ra-
diat. Transfer, 1972, 12, 111,
1569-1590 (anal.)

The isoelectronic series SeF
through ThO. I. Notes on the
band spectra of TiO, HfO and
ThO. NO extrop.K
Picpus, 1973, 3D 416

Th O (8i, u. u.) VIII 5585 1973

Albritton D. L., Harrop W. J.,
Schmeltekopf H. L., Zare
R. N., Grou E. L., J. Mol.
Spectrosc., 1973, 46, N1,
67-83

10

ThO

12 Д274. Критический анализ метода определения молекулярных постоянных из значений энергетических термов для двухатомных молекул. Albritton D. L., Harrop W. J., Schmeltekopf A. L., Zare R. N., Grow E. L. A critique of the term value approach to determining molecular constants from the spectra of diatomic molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 46, № 1, 67—88 (англ.)

мин

Рассмотрены основы двух методов вычисления значений молекулярных постоянных из эксперим. данных по вращательной структуре колебательных или электронно-колебательных спектров двухатомных молекул: 1) прямое определение молекулярных постоянных из комбинационных разностей методом наименьших квадратов при предположении одинакового распределения ошибок для нижнего и верхнего состояний (прямой метод); 2) вычисление значений энергии уровней из частот пе-

1973

отмечено 1991

(41) общ.



(41) Емолу

Ф. 1973 N 12



Е₂

переходов и определение молекулярных постоянных непосредственно из энергии уровней (метод термов). Показано, что вследствие наличия корреляции между значениями термов нижнего и верхнего состояний метод термов по сравнению с прямым методом менее надежен. Предложен усовершенствованный вариант метода термов, в котором учитывается корреляция между термами и используются различные веса для нижнего и верхнего состояний: в этом методе молекулярные постоянные вычисляются коррелированным методом наи-

меньших квадратов из значений энергии термов с использованием матрицы вариаций — ковариаций, найденной при вычислении энергии термов из частот переходов (в традиционном методе термов эта матрица скалярная). Прямой метод и оба варианта метода термов иллюстрированы на примере системы полос электронного перехода $G^1\Delta - H^1\Phi$ молекулы ThO и показано, что значения молекулярных постоянных, полученные прямым методом и по новому варианту метода термов, совпадают.

М. Р. Алнев

1973

ThO

23 Б75. Критический анализ метода определения молекулярных постоянных из спектральных термов двухатомных молекул. Albritton D. L., Harrop W. J., Schmeltekopf A. L., Zare R. N., Crow E. L. A critique of the term value approach to determining molecular constants from the spectra of diatomic molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 46, № 1, 67—88 (англ.)

E_i , м.н.

Рассмотрены основы двух методов вычисления значений молек. постоянных из эксперим. данных по вращательной структуре колебательных или электронно-колебательных спектров двухатомных молекул: 1) определение МНК молек. постоянных из комбинац. разностей в предположении одинакового распределения ошибок для нижнего и верхнего состояния (прямой метод), 2) вычисление значений энергии уровней из частот переходов и определение молек. постоянных непосредственно из энергии уровней (метод термов). Показано, что вследствие наличия корреляции между значениями

анниск 1991

Х. 1973 N 23

термов нижнего и верхнего состояний метод термов по сравнению с прямым методом менее надежен. Предложен усовершенствованный вариант метода термов, в котором учитывается корреляция между термами и используются различные веса для нижнего и верхнего состояний: в этом методе молек. постоянные вычисляются коррелированным МНК из значений энергии термов с использованием матрицы вариаций-ковариаций, найденной при вычислении энергии термов из частот переходов (в традиц. методе термов эта матрица скалярная). Прямой метод и оба варианта метода термов иллюстрированы на примере системы полос электронного перехода $G^1\Delta - H^1\Phi$ молекулы ThO и показано, что значения молек. постоянных, полученные прямым методом и по новому варианту метода термов, совпадают. См. пред. реферат. М. Р. Алиев

~~ThO~~

2

ThO (Do)

от мисл 2914 1973

Ackerzmann R. J., Rauh E. G.

High Temp. Sci" 1973, '5,
"N6, 463-473 (англ.)

~~Δ H f~~

~~кр:~~

~~Δ G f~~

Высокотемпературные свойства
системы торий-хлорид;
уточненные термодинамические
свойств  ThO (газ) и ThO₂

фр 1974

N8

(газ) (см ThO; I)

XI - 4025

1974

H₂, ThO (not used) "ff"

Aslund N,
J. Molec. Structure,
1974, 50, N1-3, 424-434



10

cc76 p. 11

ThO

H₂

(м.н.)

1974

19 Б90. Численный метод одновременного определения значений термов и молекулярных постоянных. Aslund Nils. A numerical method for the simultaneous determination of term values and molecular constants. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 50, № 1—3, 424—434 (англ.)

Развит одностадийный метод одновременного определения значений термов и молек. постоянных, к-рый является усовершенствованием использованных ранее двухстадийных методов. Метод требует сравнительно небольшого объема вычислений даже для многоэлектронных систем. Конкретно метод применен к молекулам ThO и H₂. Сравнительное испытание нового метода показало, что в нек-рых случаях введенные приближения существенно влияют на оценку ошибки в неизвестных молек. постоянных, однако сами постоянные меняются при этом мало.

Б. И. Жилинский

ж. 1974 N 19

41 ☒

$\text{PrO}_2, \text{CeO}_2, \text{TbO}_2, \text{ThO}_2$ (Vi, ^{empykt.} ^{napr.}) 1974.

$\text{PrO}, \text{CeO}, \text{TbO}, \text{ThO}$ (w_e, w_{xe}). VIII-5998

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

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

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

E.A. 1974.80.N22.126459g. 10



XVIII -176
ThO, ThO₂ (D₀⁰, J, ΔH⁰)

1979

Hildenbrand D. L., Murad E.

J. Chem. Phys., 1974, 61(3), 1232-7

10, (11)

50221.8846
Ch, Fh, TC

ThO ⁴⁰⁸⁹² 02 1974
(δ^0) #4-8113

Hildenbrand D. L., Mirad Edmond.

■ Ionization potential of thorium.

"J. Chem. Phys.", 1974, 61, N 12, 5466-5467

(англ.)

0304

279 281 0 296

ВИНИТИ

OFFICE 2540

1974

ThO

ThO₂

(D_0 , I , ΔH_f)

(+1) ☒

C.A. 1974. 81 W 24

158965n Mass spectrometric studies of gaseous thorium monoxide and thorium dioxide. Hildebrand, D. L.; Murad, Edmond (Stanford Res. Inst., Menlo Park, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1974, 61(3), 1232-7. High temp. mass spectrometric techniques were used to study the equilibria (1/2)Th(s) + (1/2)ThO₂(s) = ThO(g), (1); ThO(g) + Si(g) = Th(g) + SiO(g), (2); Th(g) + ThO₂(g) = 2ThO(g), (3). From the equil. data and related electron impact measurements the heat of formation ΔH_f , disocn. energy D_0^0 , and ionization potential IP were derived: ΔH_f (ThO [12035-93-7], g, 298.15°K) = -4.6 ± 5.9 kJ/mole; D_0^0 (ThO) = 848 ± 13 kJ/mole (or 8.78 ± 0.13 eV); IP (ThO) ≥ 6.0 eV; ΔH_f (ThO₂ [1314-20-1], g, 298.15°K) = -443 ± 25 kJ/mole; D_0^0 (ThO₂) = 1532 ± 30 kJ/mole (or 15.9 ± 0.3 eV); and IP (ThO₂) = 8 ± 1 eV. A second-law analysis of reaction (1) gives a measure of the magnitude of the electronic partition function of ThO. Difficulties in interpreting the ThO ionization threshold are described. The relationship of these measurements to recent kinetic studies is briefly discussed.

ThO (Do°).

XVIII 425

1974

Neubert A., Zmbov K. F.,

High Temp. Sci., 1974, 6 (4),
303-8.

Mass spectrometric determina-
tion of the dissociation energy of
the thorium oxide molecule.

C.A. 1975.82N16.103926d. M, 10(φ)

ThO

#4-8235

1974

(ThO)

103926d Mass spectrometric determination of the dissociation energy of the thorium oxide molecule. Neubert, A.; Zmbov, K. F. (Inst. Nuklearchem., Kernforschungsanlage Juelich, Juelich, Ger.). *High Temp. Sci.* 1974, 6(4), 303-8 (Eng). The O displacement reaction $\text{ThO(g)} + \text{La(g)} = \text{Th(g)} + \text{LaO(g)}$ was studied by a double-focusing mass spectrometer coupled with a Knudsen cell. Reaction enthalpies $\Delta H_o^\circ = 14.1 \pm 4.4$ kcal/mole and $\Delta H_{r,o}^\circ = 15.1 \pm 0.6$ kcal/mole were obtained by the 2nd- and the 3rd-law methods, resp. The dissocn. energy of the ThO [12035-93-7] mol. is $\underline{D_o^\circ(\text{ThO})} = 205.2 \pm 3.9$ kcal/mole.

C.A. 1975. 82. N16

(rev. ThO ; I)

Tho⁺
4811

Zalukas R., Corliss Ch. ~~H~~ 1974

u.n.
Member,

J. Res. Nat. Bur. Stand., 1974

A78, 163

10

Tho⁺
u.n.



ThO

* 45-4795

1974

Raich E. G.

Ackermann R. F.

"J. Chem. Phys."

1974, 60 N4, 1396 -
1400

number 2860

(J)

J (Al₂O₃; Co; Ba; BaO; U; UO₂; UO₃; Th;
ThO; ThO₂; Ti; TiO; TiO₂; ZrO; ZrO₂; 1974
Hf; HfO; HfO₂; Y; YO; La; LaO

Rauh E. G., Ackermann R. J.

IX 4603

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

First ionization potentials of some
refractory oxide vapors.

Pen gas, 1974, 9D239

10

ThD +
468

Кабанкова И.И., Москвитина Е.И. 1975
Кузнецов Ю.И.

и.и.
Mund

Вестн. МГУ. Сер. химия, 1975,
16, 620
с.

6

~~ThD~~ +
~~Set~~

и.и.

O-Th

omni. 4824

1975

Kerr J. A., et al.

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

(Lo)

ThO

ThO₂

(γ)

So

ommu 5969. 1975

Rauh E.G., et al.

Can. Metall Quast.

1975, 14, 205-11

ThO⁺
1424

Bates J. K., Dunn T. M. 1976

u. n.
Munk

Canad. J. Phys; 1976, 54, 1216

5

ThO⁺

u. n.



ThO

ThO₂

Do; y

(+6)

1976

'85: 183046s Thermochemistry of gaseous metal oxides. Hildenbrand, D. L. (Stanford Res. Inst., Menlo Park, Calif.). U. S. NTIS, AD Rep. 1976, AD-A025661, 55 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1976, 76(16), 81. The dissocn. energies and ionization potentials of gaseous oxides in the Th-O, Zr-O, Ti-O, Eu-O, and U-O systems were detd. by high temp. mass spectrometry. Dissocn. energies were derived from gaseous equil. measurements, while the ionization potentials were obtained from electron impact threshold measurements. Specifically, data were obtained for gaseous ThO, ThO₂, ZrO, ZrO₂, TiO, TiO₂, EuO, UO₂, and UO₃. Attempts to characterize the higher oxide of Al, AlO₂, were unsuccessful. New exptl. information on the ionization potentials of Th, Zr, and Eu was also obtained. The results make it possible to accurately define the energetics of a no. of ion-neutral and neutral-neutral reactions of the metals which are of importance in the anal. of nuclear burst effects.

☒



(+3)

Th, Zr, Eu (y)

C.A 1976. 25 N 24

ThO⁺
4260

1976
Shenyavskaya E.A., Ryabov B.S.

J. Mol. Spectrosc., 1976, 63, 23
p.

1

ThO⁺ ●

TiO

(оттиск 9023)
Каритонов Л. Л.

1977

Черка м. В.

(м. п.)

Рукопись деп. ВНИИМУ
23 июня 1977, № 2493-77.



(см. TiO) III.

9h0

ominux 7494

1978

Ackermann R.J.; Raue E.C.

Rev. int. Hautes Temp.

u.k. Reflect, F2, 1978, vol 15,
pp 259-80.

● (cur. Lao; 1)

ThO(r)
4921a

Barrow R.F., Clements R.M., 1979
Harris S.M., Jensen P.P.

u.u.
Munster

Astrophys. J., 1979, 229, N1,
Part 1, 439

ThO 101

u.u.

ThO

common 8963

1973

92: 49752k The spectrum of thorium oxide (ThO): rotational analysis of the $L^1\Pi-X^1\Sigma^+$ and $N^1\Pi-X^1\Sigma^+$ systems. Von Bornstedt, A.; Edvinsson, G.; Lagerqvist, A.; Renhorn, I. (Inst. Phys., Univ. Stockholm, S-113 46 Stockholm, Swed.). *Phys. Scr.* 1979, 20(5-6), 599-602 (Eng). Two new systems of ThO were rotationally analyzed. The systems are assigned $L^1\Pi-X^1\Sigma^+$ and $N^1\Pi-X^1\Sigma^+$. They are located at ~ 4020 and 3605 Å. In both systems the 0-0 and 1-1 bands were studied. Mol. consts. are given. All upper levels are somewhat perturbed.

M.N.

C.A. 1980.92, N6

ThO

опубликован 8963

1979

14 Б143. Спектр ThO: вращательный анализ систем $L^1\Pi-X^1\Sigma^+$ и $N^1\Pi-X^1\Sigma^+$. Bornstedt A. von, Edvinsson G., Lagerqvist A., Renhorn I. The spectrum of ThO: rotational analysis of the $L^1\Pi-X^1\Sigma^+$ and $N^1\Pi-X^1\Sigma^+$ systems. «Phys. scr.», 1979, 20, № 5—6, 599—602 (англ.)¹

М. П.

Исследован спектр ThO в области 4020 и 3605 Å. Источник света — разряд в кварцевой колбе, содержащей смесь неона и тетраиодида тория. Найдено две новые системы полос, отнесенные к переходам $L^1\Pi-X^1\Sigma^+$ и $N^1\Pi-X^1\Sigma^+$. Выполнен анализ вращательной структуры переходов 0—0 и 1—1. Для $L^1\Pi$ найдено: $T_0 = 24856,592(5)$, $B_0^e = 0,324460(4)$, $B_0^f = 0,324162(4)$, $D_0^e = 2,805(6) \cdot 10^{-7}$, $D_0^f = 2,727(6) \cdot 10^{-7}$, $H_0 = -6,0(3) \cdot 10^{-17}$, $T_1 = 25692,775(6)$, $B_1^e = 0,322023(6)$, $B_1^f = 0,321718(6)$, $D_1^e = 3,03(1) \cdot 10^{-7}$, $D_1^f = 2,97(1) \cdot 10^{-7}$, $H_1 = -5,6(7) \cdot 10^{-16} \text{ см}^{-1}$. Для $N^1\Pi$ $T_0 = 27718,5(1)$, $B_0^e = 0,3207$, $B_0^f = 0,3204$, $T_1 = 28538,0(5)$, $B_1^e = 0,3199$, $B_1^f = 0,3191 \text{ см}^{-1}$.

Л. В. Серебренников

2 1980 N14

ThO

Оттиски 8963

1979

5 Д325. Спектр молекул ThO: анализ вращатель-
ной структуры систем $L^1\pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ и $N^1\pi \rightarrow X^1\Sigma^+$. The
spectrum of ThO: rotational analysis of the $L^1\pi \rightarrow X^1\Sigma^+$
and $N^1\pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ systems. Von Bornstedt A., Ed-
vinsson G., Lagerqvist A., Renhorn I. «Phys.
scr.», 1979, 20, № 5—6, 599—602 (англ.)

М.Н.

В области 350—405 нм получен спектр испускания
газообразных молекул ThO, возбуждавшихся в без-
электродном разряде. Анализ вращательной структуры
полос $L^1\pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ и $N^1\pi \rightarrow X^1\Sigma^+$, локализованных в об-
ластях 360,5 и 402 нм, соответственно, позволил опре-
делить значения молекулярных констант для ThO в
возбужденных состояниях L и N . В свете полученных
данных обсуждена электронная структура ThO. Интерес
к молекуле ThO вызван, в частности, тем, что ее энер-
гия диссоциации в основном состоянии (8,78 эв) мень-
ше первого потенциала ионизации (~6 эв). Это
обстоятельство может быть использовано для лазер-
ного разделения изотопов Th в процессе многофотон-
ной ионизации.

М. Т.

Ф. 1980 N 5

~~1980~~ ThO^+ 1980
2102 Douglas A.E., Veilleux P.M.

u.n.
Monday J. Chem. Phys., 1980, 72, 5378
p.

3 ThO^+ ●
u.n.

ThO⁺
4259

Shenyavskaya E.A., Gurvich L.V. 1980

с.н.
Менделеев

J. Mol. Spectrosc., 1980, 81, 152
p.

2

ThO⁺
с.н.



ThO_x

[Om. 17833]

1982

Hildenbrand D. L.

y;

1982 (расейное сообще-
ние)



ThO

1984

/ 101: 62916r A new band system of thorium monoxide (ThO).
Behere, S. H.; Wentink, Tunis, Jr.; Laud, B. B. (Dep. Phys.,
Marathwada Univ., Aurangabad, 431 004 India). *Indian J. Phys.*, B
1984, 58B(1), 52-6 (Eng). A UV bond study of ThO indicated that
the 3340-Å system arises largely from a $^3\Delta-^3\Delta$ transition. The
transition may terminate on the $^3\Delta$ state of the $C'^3\phi_2-C''^3\Delta$, system.
The sepn. Y_1, Y_2 of the upper and lower electronic states are related
to the wavenos. of the (0,0) bands of the 3 systems by the relations
 $y_2''-y_2' = \nu_\alpha(0,0)-\nu_\beta(0,0) = 41.67 \text{ cm}^{-1}$ and $y_1''-y_1' = \nu_\gamma(0,0)-\nu_\alpha(0,0)$
 $= 413.14 \text{ cm}^{-1}$. The small difference between y_2' and y_2'' suggests
that a pair of the upper and lower electronic states have almost the
same splitting.

Yop cnekmp

$C'^3\phi_2-C''^3\Delta$

C.A. 1984, 101, N 8

ThO

1984

101: 45705d. On the 4115 Å system of thorium monoxide (ThO). Behere, S. H.; Wentink, Tunis, Jr.; Laud, B. B. (Dep. Phys., Marathwada Univ., Aurangabad, 41004 India). *Indian J. Phys.*, B 1984, 58B(1), 15-22 (Eng). The 4115 Å system of ThO not previously analyzed was excited by a d. c. arc source. Spectra were recorded with a 10.6-m concave grating spectrograph. The vibrational and rotational analyses carried out indicate that the emission transition is $C'^3\Phi_2 - C''^3\Delta_2$.

Cucumella

B.O.N. 4115 Å,

M.N.

 $C'^3\Phi_2 - C''^3\Delta_2$ C.A. 1984, 101, N 6

ThO

[Om. 20912] 1984

102: 35706m Rotational analysis of yellow and near infrared bands in thorium(II) oxide. Edvinsson, G.; Lagerqvist, A. (Inst. Phys., Univ. Stockholm, S-113 46 Stockholm, Swed.). *Phys. Scr.* 1984, 30(5), 309-20 (Eng). Three new systems in the mol. spectrum of ThO were rotationally analyzed. They are located in the yellow region of the spectrum. Two bands at 5600 and 5615 Å are the 0-0 and 1-1 bands of a system named P-H. One band at 5613 Å is another 0-0 band of a system called O-H. The states O and P both have $\Omega = 0$ with different symmetries. Another band at 5579 Å was also analyzed. Its position in the term scheme of ThO is unknown. New measurements and an extended anal. of the previously investigated -G-H transition were performed. A term scheme and a table of mol. consts. for all known states in ThO is given.

некрох.
чекмр,
фраузан.
атану (схема некрох,
М.Н.)
С. А. 1985, 102, N4.

ThO

(Om. 21973) 1985

/ 103: 112588z A low-lying $\Omega = 2$ state in the thorium monoxide (ThO) molecule. Edvinsson, Gunnar; Lagerqvist, Albin (Dep. Phys., Univ. Stockholm, S-113 46 Stockholm, Swed.). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 113(1), 93-104 (Eng). A new, low-lying excited state called Q with $\Omega = 2$ was found in ThO. Analyses of transitions from previously known excited states to this Q state have made it possible to accurately relate the G, H, O, and P states to the ground state X0. The mol. consts. (cm^{-1}) obtained for the Q state are T_0 , 6127.92; ω_e , 858.42; $\omega_e X_e$, 2.29; B_e , 0.32703; α_e , 0.00133; and D_0 , 1.919×10^{-7} .

Кукле бот.
СОСМОЛЕТУЛ;

М.А.

C.A. 1985, 103, N 14.

ThO

(Om. 21973)

1985

3 Б1146. Низколежащее состояние $\Omega=2$ молекулы ThO. A low-lying $\Omega=2$ state in the ThO molecule. Edvinsson Gunnar, Lagerqvist Albin. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 113, № 1, 93—104 (англ.)

Выполнен анализ вращат. структуры ряда систем полос в красной обл. спектра испускания молекулы ThO. Спектр возбуждался безэлектродным разрядом в кварцевой ячейке, содержащей ThJ₄ (газ-носитель Ne) и связан с переходами в ранее не наблюдавшееся низколежащее электронное состояние с $\Omega=2$, $Q, M \rightarrow Q$ (полосы $0-0, 1-1, 2-2$), $G \rightarrow Q$ ($0-0$), $N \rightarrow Q$ ($0-0, 1-1$). Значения молек. постоянных ThO ($Q, \Omega=2$) (в см⁻¹): $T_0=6127,92$, $\omega_e=858,42$, $\omega_e x_e=2,29$, $B_e=0,32703$, $\alpha_e=1,33 \cdot 10^{-3}$, $D_0=1,92 \cdot 10^{-7}$, $R_e=1,856$ Å. Аналогичные данные приведены еще для 16 известных электронных состояний молекулы.

В. М. Ковба

М.П.

Х. 1986, 19, №3

ThO

(Dm 21973)

1985

3 Л239. Низколежащее состояние $\Omega=2$ молекулы ThO. A low-lying $\Omega=2$ state in the ThO molecule. Edvinsson Gunnar, Lagerqvist Albin. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 113, № 1, 93—104 (англ.)

В спектре испускания разряда в ThJ₄ в области 6330—6470 Å зарегистрированы полосы, приписанные переходам в новое состояние Q с $\Omega=2$ молекулы ThO. Анализ переходов из ранее известных состояний в новое состояние Q позволил определить положение состояний G, H, O и P по отношению к основному состоянию XO с большой точностью. Определены молекулярные постоянные для нового состояния (в см⁻¹): $T_0=6127,92$, $\omega_e=858,42$, $\omega_e x_e=2,29$, $B_e=0,32703$, $a_e=0,00133$, $D_0'=1,919 \cdot 10^{-7}$. В. С. И.

(8i)

сб. 1986, 18, 143.

ThO

Om. 23418

1985

104: 98515k Rotational analysis of two red band systems in the thorium oxide (ThO) spectrum. Edvinsson, G.; Lagerqvist, A. (Inst. Phys., Univ. Stockholm, S-113 46 Stockholm, Swed.). Phys. Scr. 1985, 32(6), 602-10 (Eng). Two band systems in the red

region of the ThO spectrum were analyzed. The systems are called R-H and S-Q. The H and Q states are known low lying excited states. The new excited states R and S have $\Omega = 0^-$ and 3 resp. Small perturbations in the R state were studied. The upper and lower states of the previously analyzed 5579 Å band were identified and put into the term scheme.

браз.
анал.,
схема термов

с. А. 1986, 104, N 12

TKD

Om. 25382

1986

Bhartiya F.B., Behere S.H.,

Current Sci, 1986, 55,
N8, 383-385.

Do

ThO

1986

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

De;

Curr. Sci. (India),
1986, 55, N 8, 383-385.

(curr. HfO; III)

ThO

1987

(M. 26296)

106: 146340q Rotational analysis of some violet and green bands in the thorium oxide (ThO) spectrum. Edvinsson, Gunnar; Lagerqvist, Albin (Dep. Phys., Univ. Stockholm, S-113 46 Stockholm, Swed.). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 122(2), 428-39 (Eng). Four new systems in the ThO spectrum were rotationally analyzed. Going to increasing wavelengths they are designated U-X, Y-W, U-H, and Z-Q. U, Y, W, and Z are new electronic states. They have $\Omega = 1, 2, 3$, and 2 , resp. X is the ground state with $\Omega = 0^+$; H and Q are previously known states having $\Omega = 1$ and 2 . In the Z-Q system, the 0-0 and 1-1 bands are treated, in the others only the 0-0 bands are treated. The vibrational numbering of the Y-W band is somewhat doubtful; it might be the 0-1 band and not the 0-0 band. The Y and W states can not be placed in the term scheme. Perturbations in the U state are discussed. The mol. consts. for the new states are given.

(новые
системы)

M. N.

C. A. 1987, 106, 218

ThO

Om 26296

1987

№ 18 Б1160. Вращательный анализ некоторых полос в фиолетовой и зеленой области спектра ThO. Rotational analysis of some violet and green bands in the ThO spectrum. Edvinsson Gunnar, Lagerqvist Albin. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 112, № 2, 428—439 (англ.)

Измерена и проанализирована вращат. структура четырех новых систем в спектре испускания ThO (микроволновый безэлектродный разрядный источник, содержащий ThJ₄) отнесенных к переходам $U-X$ ($\Omega=0^+$), $Y-W$, $U-H$ ($\Omega=1$) (полосы $0-0$) и $Z-Q$ ($\Omega=2$) (полосы $0-0$ и $1-1$). Состояния U , Y , W и Z ($\Omega=1$, 2 , 3 и 2 , соотв.) ранее не наблюдались. Системы $U-H$ и $Z-Q$ лежат в области $503,0-512,5$ нм, а системы $Y-W$ и $U-X$ — в диапазонах $426,0-430,0$ и $397,0-402,0$ нм соотв. Положения начал полос, значения вращат. и др. постоянных ThO (в см⁻¹): система $Z-Q$ полоса $0-0-t_0=19675,133$, $B'=0,31923$, $D'=$

M. N.

X. 1987, 19, N 18

$= 2,03 \cdot 10^{-7}$, $T_0' = 25803,054$; $1-1 - \tau_0 = 19621,80$, $B' =$
 $= 0,31852$, $D' = 2,19 \cdot 10^{-7}$, $\Delta G'_{1/2} = 800,51$, $T_1' = 26603,56$;
 $Y-W - v_0 = 23416,425$, $B' = 0,32495$, $D' = 2,19 \cdot 10^{-7}$,
 $B'' = 0,32692$, $D'' = 1,87 \cdot 10^{-7}$; $U-X - v_0 = 25136,90$,
 $B_f' = 0,31868$, $D_f' = 0,54 \cdot 10^{-7}$; $U-X$, $U-H-B_e' =$
 $= 0,31881$, $D_e' = 0,56 \cdot 10^{-7}$, $T_H = 5316,615$. В. М. Ковба

ThO

Im. 26296

1987

№ 10 Л186. Анализ вращательной структуры ряда фиолетовых и зеленых полос в спектре ThO. Rotational analysis of some violet and green bands in the ThO spectrum. Edvinsson Gunnar, Lagerqvist Albin. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 122, № 2, 428—429 (англ.)

С высоким разрешением зарегистрированы эмиссионные спектры ThO с использованием источника с безэлектродным ВЧ-разрядом. В сине-фиолетовой и зеленой области спектра идентифицированы четыре новых системы полос: $U=X$, $Y=W$, $U=H$ и $Z=Q$. Проведен анализ колебательной и вращательной структуры спектров. Для четырех впервые обнаруженных состояний U , Y , W и Z определены спектроскопич. константы. В. К. Р.

М.П.

ф. 1987, 18, ч 10

ThO

1988

108: 121315p Two band systems of thorium oxide (ThO) in the near ultraviolet. Edvinsson, Gunnar; Lagerqvist, Albin (Dep. Phys., Univ. Stockholm, S-113 46 Stockholm, Swed.). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 128(1), 117-25 (Eng). Two new band systems in the near-UV region of the ThO spectrum were rotationally analyzed. The corresponding transitions are designated $A'(0^+) - X(0^+)$ and $B'(\Omega = 1) - X(0^+)$. Mol. consts. for the new electronic states A' and B' are given.

$A'0^+ - X0^+$

u $B'(\Omega=1) - X(0^+)$

M.N

C.A. 1988, 108, N 14

ThO

1988

16 B1188. Две системы полос ThO в ближней ультрафиолетовой области. Two band systems of ThO in the near ultraviolet. Edvinsson G., Lagerqvist A. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 128, № 1, 117—125 (англ.)

В ближней УФ-обл. сфотографированы две системы полос в спектре испускания молекулы ThO возбуждаемом в микроволновом разрядном источнике содержащем ThJ_4 . Полосы отнесены к переходам $A'(0^+) \rightarrow X(0^+)$ (полоса 0—0) в $B'(\Omega=1) \rightarrow X(0^+)$ (полосы 0—0, 1—1, 2—2, 0—1, 1—2, 2—3, 3—4). Дан перечень и отнесение линий и проанализирована вращат. структура полос 0—0 системы $A' \rightarrow X$, 0—0, 1—1 и 2—2 системы $B' \rightarrow X$. Отмечены небольшие возмущения в структуре полос 1—1 и 2—2. Значения молек. постоянных ThO (в см^{-1}): состояние $A' - v_0 = 28028,825$, $B_0' = 0,31790$, $\Delta B = -0,01406$; состояние $B' - T_0 = 30312,99$, $\omega_e = 830,28$, $\omega_e x_e = 4,28$, $B_e(e) = 0,32765$, $B_e(f) = 0,32744$, $\alpha_e(e) = 0,00182$, $\alpha_e(f) = 0,00174$, $D_0(e) = 1,94 \cdot 10^{-7}$, $D_0(f) = 1,99 \cdot 10^{-7}$, $R_e = 1,854 \text{ \AA}$. В. М. Ковба

X, 1988, 19, N 16

ThO

1988

11 Л219. Две системы полос ThO в близкой УФ-области. Two band systems of ThO in the near ultraviolet. Edvinsson Gunnar, Lagerqvist Albin. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 128, № 1, 117—125 (англ.)

С высоким разрешением исследован спектр испускания молекул ThO в близкой УФ-области. Положения линий определены с точностью 0,0006 Å. Идентифицированы две новые системы полос $A'(0^+)—X(0^+)$ и $B'(\Omega=1)—X(0^+)$. Выполнен их вращательный анализ. Определены значения молекулярных постоянных для состояний A и B.

В. С. Иванов

М.А.

ф. 1988, N 11

ThO

om. 30435

1988

109: 216237z Bonding and electronic structure in diatomic thorium oxide (ThO): quasirelativistic effective core potential calculations. Marian, Christel M.; Wahlgren, Ulf; Gropp, Odd; Pyykko, Pekka (Inst. Theor. Phys., Univ. Stockholm, S-11346 Stockholm, Swed.). *THEOCHEM* 1988, 46, 339-54 (Eng). CAS-SCF and CCI calcs. have been performed on several low-lying electronic states of ThO, using quasirelativistic (one-component) effective core potentials. The relativistic effects are incorporated using the "no-pair" equation with free-particle projection operators. The three lowest electronic states can be identified with exptl. detected Ω levels. The bond is formed by thorium d_z and d_{xz} electrons interacting with oxygen p_z and p_x , while the 7s electrons are essentially one pair. The availability of 5f orbitals for hybridization increases the overlap between the 6d and 2p orbitals and strengthens the bond considerably. The Th populations for the $X^1\Sigma^+$ state are R_e are $7s^{1.707}p^{0.226}d^{1.125}f^{0.35}$. Iterative relativistic extended Hückel calcs. give a qual. similar picture of the bonding.

(microm; pacem)

C.A. 1988, 109, N 24

ТНД

О.М. Зорыч

1988

44 Б1030. Связь и электронная структура двухатомной молекулы ThO. Расчеты с использованием квазирелятивистского эффективного потенциала остова. Bonding and electronic structure in diatomic ThO: Quasirelativistic effective core potential calculations / Marian C. M., Wahlgren U., Gropen O., Pyykkö P. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1988.— 169.— С. 339—354.— Англ.

Вблизи равновесного расстояния основного состояния ($3,5 \leq R \leq 3,9$ ат. ед.) рассчитаны потенциальные кривые для связанных состояний $X^1\Sigma^+$, $^3\Delta$, $^3\Pi$, $^1\Delta$ и $^1\Pi$, а также для несвязанных в этой обл. состояний $^1,^3\Phi$ молекулы ThO. Влияние электронов остова ($1s-5s$, $2p-5p$, $3d-4d$) аппроксимировано модельным Pt, учитывающий релятивистские эффекты и представленным разл. по гауссовым ф-циям. Для описания валентных орбиталей использованы базисы типа $22s18p13d6f$. МО оптимизированы многоконфигурац. методом МК ССП в варианте

М.П.

X. 1989, NY

полного активного пространства; затем применен широкомасштабный метод конфигурац. взаимодействия с группировкой конфигураций. Определены молек. постоянные для всех перечисленных связанных состояний молекулы. Для состояния $X^1\Sigma^+$ энергия диссоциации составила 7,85 эВ эксперим. значение 9,1). На основе малликеновских заселенностей обсуждены качественные аспекты хим. связи в молекуле; аналогичная качественная картина связывания получена и в релятивистском варианте расширенного метода Хюккеля.

А. В. Немухин



ThO

от. 30435

1988

2 Д113. Химическая связь и электронная структура в двухатомной молекуле ThO: расчеты с использованием квазирелятивистского эффективного остоного потенциала. Bonding and electronic structure in diatomic ThO: quasirelativistic effective core potential calculations / Marian Christel M., Wahlgren Ulf, Groen Odd, Pyykkö Pekka // J. Mol. Struct. Theochem.— 1988.— 169.— С. 339—354.— Англ.

Методом МКССП в варианте полного пространства активных орбиталей (ППАО) с последующим учетом электронной корреляции многоконфигурац. методом КВ выполнено изучение химич. связи и электронной структуры в молекуле ThO. При этом в ППАО остоные орбитали аппроксимировались с помощью квазирелятивистского эффективного остоного потенциала (ЭОП). В КВ учитывались вклады конфигураций, одно- и двукратно возбужденных по отношению к исходным, в качестве которых выбирались конфигурации, имеющие в разложении волн. ф-ции МКССП значение коэф. не

М.П.

ф. 1989, № 2

меньше чем 0,05. Вклады четырехкратных возбуждений в КВ учитывались путем введения поправки Давидсона. Расчеты ThO также выполнены с помощью релятивистского расширенного метода Хюккеля, позволяющего оценить влияние на получаемые результаты эффектов гибридизации $6p$ -орбитали, которая в расчетах с использованием ЭОП включалась в остов. Найдены потенц. кривые трех низших $X^1\Sigma^+$, $^3\Delta$ и $^3\Pi$ электронных состояний ThO.

А. И. К.

ThO

Om 33178

1990

, 112: 242385c Two new band systems in thorium oxide (ThO).
Edvinsson, G.; Lagerqvist, A. (Dep. Phys., Univ. Stockholm, S-113
46 Stockholm, Swed.). *Phys. Scr.* 1990, 41(3), 316-20 (Eng).
Two new band systems in the spectrum of ThO were found and
rotationally analyzed. The systems are called C'-X and D'-H. The
new found excited states C' and C' have $\Omega = 1$ and 2 resp. The C'
and D' states are both irregular due to perturbations.

C'-X, D'-H,
M.A.

C.A. 1990, 112, N26

ThO

Ulfredsson

1991

117: 78853j On the K-X and M-X band systems of thorium monoxide (ThO). Edvinsson, G.; Jonsson, J. (Dep. Phys., Univ. Stockholm, Stockholm, Swed.). Report 1991, USIP-91-01:ETN-= 91-99499, 30 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Sci. Tech. Aerosp. Rep. 1991, 29(22), Abstr. No. N91-30922. The band systems K-X and M-X in the spectrum of ThO are reinvestigated. The K and M states are excited $\omega = 1$ states and the X state is the ground state

with $\omega = 0(+)$. The first anal. of these band systems is confirmed and extended. Three new bands are found and rotationally analyzed. Homogeneous perturbations between the K and the M states are studied. The vibrational level $v = 3$ of the ground state is analyzed for the first time. Equil. consts. for the ground state are detd. from 11 bands. Wave nos. of all analyzed lines, not published before, are given.

(K-X, M-X
0(+))

М.А., ОЧКОВ. ССМ.

С.А. 1992, 117, 118

ThO

1994

Kleeckle W., Dolg M.,
et al.

теор.
расчет
электр.
соед.

J. Chem. Phys. 1994,
100 (10), 7535-42.

(ссылка на статью в журнале)

PhD

(OM. 37484)

1994

непрям.
спектр.
пр.

Kaledin L.A., McCord G.E.
et al.

~~Submitted to:~~ Journal of
Molecular Spectroscopy 164 (1), 27-65
Laser Spectroscopy of ILO:
Characterization and Assignment
of States in the 0-3 eV Range

With a comparison to the Electronic
Structure of ThO .

ThO

<OT 38883>

1997

127: 253387r All-electron Dirac-Fock-Roothaan calculations for the ThO molecule. Watanabe, Yoshihiro; Matsuoka, Osamu (Department of Chemistry, Kyushu University, Ropponmatsu, Fukuoka, Japan 810). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(9), 3738-3739 (Eng), American Institute of Physics. Accurate all-electron Dirac-Fock-Roothaan calcs. were performed for the $^1\Sigma^+$ ground state of ThO using Gaussian basis sets of Th(24s20p16d8f)/[19s14p12d5f] and O(10s6p1d)/[7s4p1d]. The relativistic effects in ThO were found to slightly extend the bond length r_e , to increase the dissociation energy D_e , and to decrease the harmonic frequency ω_e .

r_e, D_e, ω_e ,
meop. param

C.A. 1997, 127, N18

ThO

(On. 38883)

1997

Yoshihiro Watanabe
and Osamu Matsuoaka,

M.N.,
neop-
parat

J. Chem. Phys., 1997,
107(9), 3738-39

Th-Lr

Seijo, Luis, et al., ²⁰¹¹

(mop. pacem) J. Chem. Phys. 2001,
114 (1), 118-128.

(Bill. 6-2-2000) III,

ThO^+

(DM 41389)

2002

Marta Santos, Joaquim
Margalo⁺ et al.,

Do
g. Phys. Chem. A 2002,
106, N 31, 7190-94.

Gas - Phase
Reactions of

● Oxidation
Neptunium

and Plutonium Ions Investigated
via Fourier Transform Ion
Cyclotron Resonance Mass Spect
rometry.

TRD

[Om. 41735]

2003

Gozeq Paulović et al.,

J. Chem. Phys., 2003,

119, N 2, 798 - 805.

Relativistic
calculations



and correlated
on the ground

and excited states of ~~the~~ ~~the~~
ThO.

