

CrD

VII 1184.

1932

CrO (Ф) (окись хрома)

Ghosh C.

Z. Physik , 1932, 78, 521-526

Ест. Ф. Н.

C.A., 1933, 465.

Ю.

CrO
2234

Ferguson W. F. C. ¹⁹³²

u. n.
Candida

J. Res. NBS, 1932;
8, p. 381.

CrO

1



ref. 12.

CrO
2002

Davis D. N.

1947

энерг
Cameurola

Astrophys. J., 1947, 106,
p. 28.

Cr O

8



энерг

CrO
MnO

Huldt By L. and Lagerqvist

Arkiv fys., 1951, 3, 132, 525

Do

Determination of dissociation energies of diatomic molecules from spectroscopic intensity measurements.



The disso  ciation energies of CrO and MnO.

есть оммуек

1952

Bcp VI-1679

CrO, MnO(Do)

Huldt L., Lagerqvist A.

Arkiv Fysik, 1952, 3, 525-31.

Determination of dissociation energies of diatomic molecules from spectroscopic intensity measurements. The dissociation energies of chromium oxide and manganese oxide.

J,

FE G T L CA, 1953, 931c
Q. R.

1953

G40

J. K. Kiess, C.

J. Res. NBS 1953 51, 15,
247-305

Описание и анализ
спектра нейтрального
хрома.

Энергия ионизации
хром 54570 ± 2 см 8-е-6764
Мейден 40 гоме св в
абн 11036-5546 А

CrO

~~FeO~~

Д.

Энерг.

диссоц.

Лагерквист, Гунд

1953

Lagerqvist A., Hult L.,

Z. Naturforsch., 1953, 8a, 453

Энергия диссоциации газобр.

CrO и FeO



(CrO)

FeO

Do

Bp - 1135 - VI

На репробит, Худоб
Legerqvist A., Hult L.

11353

Z. Naturforsch., 1953, 8a, 483

Измерения коэффициентов диффузии
в окислах CrO и FeO

Измерения коэффициентов диффузии
по результатам измерения
интенсивности линий Cr и Fe
использованы в атомно-абсорбци-
онном анализе. $D(\text{CrO}) = 5,3 \pm 0,4$

$D(\text{FeO}) = 4,3 \pm 0,5$ п.е.

C.A. 1954 - 5636c

155-3

8a, 18 1433-9128.

Bro u Feo

7. Kuizone Dgas pada corong 200.5

- gas Cu. ($T = 243.15 \text{ K}$)

gas FeO ($T = 2431, 2534, 2240^\circ\text{K}$)

W.S. Benedict, C.K. Tyler.

1954.



J. of Research of the NBS.

Vol. 53, No. 3, Aug. 1954 161pp

Infrared Emission Spectra of Cyanide
and Dicarbon Radicals.

изобр. 057. 1-1,3 м. из-мис. и ланис измис
завлени. Внутренний контур. Но ланис
интен. в полосе C_2 и CN определялся
температура  2600 ± 200°K.

CrO
3026

Keenan B., ~~and~~
Liljeqvist B.

1955

енекр
2
Самсхрла

Arkiv. fys., 1955, 9,
p. 377.

CrO

5



енекр.

CrO
3663

Ninomiya M.

1955

et. n.
Camerun

J. Phys Soc. Japan, 1955,
10, p. 829.

4

CrO



et. n.

VII 1473

1955

CrO. (Be, L, ze)

Ninomiya M.

J. Phys. Soc. Japan, 1955, 10, n 10,
829-836

РЖЕХ, 1956, 28221.

Мел.

семь ф.к.

CrD

Osmunda 3171.

1957

G. Herzberg.

(No)

Mem. Soc. Roy. Sci. Liege
1957, 18, 397-418

CO.

1957

- 1) Kleman B., Li Gergvist B - Emission spectra
on the near infrared; Arkiv Fysik, 9,
377-383 (1954)
- 2) Lagerqvist A, Hult L - 12, 491-494 (1957)
- 3) Ninomiya M. - Rotational analysis of
the CO bands.
J. phys. Soc. Japan, 10, 229-236 (1955).

Berg, R.A., Sinanoglu O. - J. Chem. Phys, 32,
1082-1087 (1960).

Ferguson W.C.F. Bur. Standards, J. Res,
8, 381-384 (1952)

Ghosh C - Z. Physik, 78, 521-526 (1932)

CrO
2374

Gatterer. A., Junkes J.
Sulpheter E. W. ~~and~~ Rosen B. ^{ES}

спектр
Crucifera

"Molecular Spectra of
metallic Oxides" Ed.
Specola Vaticana, 1957.

CrO

11

спектр.

1961

VII-762

24Б445. Термодинамика испарения Cr_2O_3 . Энергии диссоциации CrO , CrO_2 и CrO_3 . Grimley R. T., Burns R. P., Inghram Mark G. Thermodynamics of the vaporization of Cr_2O_3 : dissociation energies of CrO , CrO_2 , and CrO_3 . «J. Chem. Phys.», 1961, 34, № 2, 664—667 (англ.).—С помощью масс-спектрометра изучено испарение Cr_2O_3 в нейтр. и окислительных условиях. Образцы Cr_2O_3 помещались в молибденовую эффузионную камеру, футерованную изнутри перекристаллизованной Al_2O_3 . Отношение площади эффузионного отверстия (диам. 1 мм) к поверхности испарения равно 10^{-3} . Для создания окислительных условий в эффузионную камеру мог вводиться кислород. Масс-спектр паров над Cr_2O_3 и потенциалы появления зарегистрированных ионов показали, что в газовой фазе имеются Cr , CrO , CrO_2 , O и O_2 , а при испарении в окислительных условиях — также и CrO_3 . Неизменность масс-спектра во времени при постоянной т-ре указывает, что Cr_2O_3 испаряется конгруэнтно. Откалибровав прибор по Ag , авторы определили парц. давления компонентов. Используя литературные мол. постоянные

CrO
 CrO_2
 CrO_3
 Cr_2O_3

н. 1961.24.

см. н/об.

для CrO и оценив их для CrO_2 и CrO_3 , авторы определили ΔH_0^0 для р-ций $\text{CrO}(\text{газ}) \rightarrow \text{Cr}(\text{газ}) + \frac{1}{2}\text{O}_2(\text{газ})$, $\text{CrO}_2(\text{газ}) \rightarrow \text{Cr}(\text{газ}) + \text{O}_2(\text{газ})$, $\text{CrO}_3(\text{газ}) \rightarrow \text{Cr}(\text{газ}) + \frac{3}{2}\text{O}_2(\text{газ})$. Комбинацией этих данных с энергией диссоциации O_2 получены величины D_0^0 для CrO $101,1 \pm \pm 7$, CrO_2 $227,1 \pm 15$ и CrO_3 341 ± 20 ккал/моль. Ю. Х.



VII-762

1961

Cr₂O₃

CrO
CrO₂
CrO₃

D₀

Thermodynamics of the vaporization of Cr₂O₃: dissociation energies of CrO, CrO₂, and CrO₃. R. T. Grimley, R. P. Burns, and Mark G. Inghram (Univ. of Chicago). *J. Chem. Phys.* 34, 664-7(1961).—The vaporization of Cr₂O₃ was studied by mass-spectrometric methods. The vaporization proceeded with the formation of Cr, CrO, CrO₂, at. O, and mol. O as the principle gaseous species. Under oxidizing conditions, CrO₃ was also observed. Dissocn. energies of the gaseous mols. were $D_0^\circ(\text{CrO}) = 101.1$, $D_0^\circ(\text{CrO}_2) = 227.1$, and $D_0^\circ(\text{CrO}_3) = 341$ kcal./mole.
Henry Leidheiser, Jr.

C.A. 1961 55:26
26636c

1965

Calc. no. 11
Cr-O

Vibrational frequencies of the chromium-oxygen bond and the oxidation state of chromium. J. A. Campbell (Harvey Mudd Coll., Claremont, Calif.). *Spectrochim. Acta* 21(4), 851-2 (1965)(Eng). The ir spectra of BaCrO_4 , $\text{Ba}_3(\text{CrO}_4)_2$, Ba_2CrO_4 , and Cr_2O_3 in the $1000\text{--}400\text{-cm.}^{-1}$ range show a regular decrease in the Cr—O stretching frequency as the oxidn. state of the Cr decreases. RCSQ

C. A. 1965. 62. 11
12612 de

CrO.

1969

to 1298

Spencer

and

copying

Leo Brewer, Gerd Rosenblatt.

"Adv. in High Temp. Chem."

1969, 2, I-83.

1962

1969

Cr-O

cbzgs

(1_{ce})

(0731x) Chromium(II) oxide. Brauer, Georg; Reuther, H.; Walz, H.; Zapp, K. H. (Univ. Freiburg/Br., Freiburg/Br., Ger.). *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1969, 369(3-6), 144-53 (Ger). Cr₂O₃ and V₂O₃ were heated in high vacuum at 1300° to give a homogeneous mixt. phase (CrO)_x(VO)_{1-x} ($x = 0-0.12$). The MnO-CrO and ZnO-CrO systems were immiscible; thus, no mixt. phase was obsd. The metal-O distances (2.33 Å) in CrO are compared with previously published values. CJJG

C.A. 1970. 72.2

90711.3360

Ch, Ph

Mud, CrO, Mgo, BP
Fed (D.) 316041869
VI-6695

Zeegers P.J.Th., Townsend W.P., Wineford-
ner J.D. Estimation of free-atom fraction
and dissociation energies of compounds
in flames by an atomic absorption method.
"Spectrochim. acta", 1969, B24, N 5, 243-
254 (см. Mud. III (англ.). 1093 ББК :

1072 1073 1086 Д, Б, М ВИНИТИ

СГО
(м. на об.)

жесткие
связи,

до

Квешуль Т.Ф.,
Толодеев Г.И.

1970

М. гос. химии,

1970, 44, № 9, 2142.

● (св. TiO) III

Равновесное расстояние, $\text{\AA}$		Энергия диссоциации, эв (расчет)
расчет	эксперимент	
CrO 1,5	1,63	12,7

Gr O

omnium 7684

1974

Samoilova A. N.
Efremov Yu. M. et al.

u.n.

" Khim Vys. Energ " 1974, 8(3)
229-34 (Russ)

(en WO. III)

C.A. 1974-81. N 18

С20
334

Турлер Л.В., Караченцев Т.В., 1974
Кондратов В.Н., Лебедев Ю.А.,
Медведев В.А., Потанин В.К., Хасеев Ю.С.

М.И.
Самойлова
М.С.

"Энергия разрыва химических
связей. Потенциалы ионизации
и сродство к электрону." Москва,
Наука, 1974.

(С20)

18

(М.И.)

O-Cr

omm. 4824

1975

Kerr J. A., et al.

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

(Do)

GrO

LOMM 4894

1976

Sherwood P.M.A.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. 1976, Part 2, 72,
N10, 1791-804

(not on
accpt.)

CrD

*4-17794

1976

Siddarama B. L. et al.

(u.n) Indian J. Pure and
Appl. Phys, 1976,

14 N3 ● 238-39

CrO
3843

Кв. мех.
расчет
мол.
Самойлова

17

Pinchmel B., Schamps J.
1976/

Chem. Phys., 1976, 18,
p. 481

~~Steno~~ CrO
(CrO) ●

кв.-мех. расчет
Самойлова
(м.м.)

CrO

Blackburn M. B.

1978

Spectrochim. acta, 1978, A34,
v9, 847-852.

спектр
гидроксида.

(см. CaOH) III

CrO

1979
92: 137860z The potential-energy curves for $B^5\pi$ and $X^6\pi$ states of the chromium oxide (CrO) molecule. Gowda, L. Siddarama; Murthy, N. Sreedhara (Dep. Phys., Univ. Mysore, Mysore, 576006 India). *Acta Cienc. Indica, [Ser.] Phys.* 1979, 5(3), 98-100 (Eng). The difference between the calcd. and obsd. values of the rotational const. α_e is a measure of the deviation of the Morse curve from the true potential energy curve. As this deviation is significant for both the states of CrO, the true potential-energy curves are preferred for the computation of the vibrational transition probabilities which are required in the interpretation of the exptl. intensities of CrO (B-X) band system of astrophys. importance.

nomens.
Kfubae

Beefes

C.A. 1980.92, N16

U20
2472

Green D.W., Reedy G.T.,
Kay J. C.

6761
1979

u.n.
Carnegie

J. Mol. Spectrosc., 1979,
78, p. 257

15

FeO
(CrO)●

see. 12.

1979

cro

Merer A. J.

Proc. Yamada Conf.

Free Radicals 3-rd
1979, 140-54

chekop

see CLOS. i III

CrO
2736

Huber K. R., ~~and~~ 1979
Herzberg G.

u.n.

Caucunota

Molecular Spectra and
Molecular Structure IV. Constants
of Diatomic Molecules. ~~Van~~
~~Nostrand Reinhold Company, New York.~~
~~1949.~~ N.Y. etc., Van Nostrand
CrO Reinhold Co., 1979.

13

см. N 1491a III том.

стр. 12.

оттиски 9777

1980

CrO

12 Д351. Возбуждаемый в разряде спектр испускания и спектр индуцированной лазером флуоресценции молекулы CrO. Вращательный анализ перехода $A^5\Pi - X^5\Pi$. Laser-induced fluorescence and discharge emission

spectra of CrO. Rotational analysis of the $A^5\Pi - X^5\Pi$ transition. Hocking W. H., Merer A. J., Milton D. J., Jones W. E., Krishnamurty G. «Can. J. Phys.», 1980, 58, № 4, 516—533 (англ.; рез. франц.)

Выполнен вращательный анализ перехода CrO($A^5\Pi - X^5\Pi$), $\lambda \sim 6000 \text{ \AA}$ в возбуждаемом в тлеющем разряде спектре испускания и в спектре индуцированной лазером флуоресценции CrO. Отмечено, что молекула CrO является первой молекулой, для которой удалось выполнить полный вращательный анализ квинтетной системы полос. Обнаружено, что вращательная структура состояния $A^5\Pi$, возмущена взаимодействиями с целым рядом других электронных состояний не проявляющихся непосредственно в спектре испускания. Библ. 25.

М.П.

13-99-1111-3062

ф. 1980. №12

СЧО

Оттиск 9777

1980

22 Б148. Спектры флуоресценции CrO индуцируемые лазером и спектры испускания, возбуждаемые в разряде. Анализ вращательной структуры перехода $A^5\Pi-X^5\Pi$. Hocking W. H., Merer A. J., Mil-
ton D. J., Jones W. E., Krishnamurty G. Laser-induced fluorescence and discharge emission spectra of CrO . Rotational analysis of the $A^5\Pi-X^5\Pi$ transition. «Can. J. Phys.», 1980, 58, № 4, 516—533 (англ.)

Проведено повторное исследование электронного перехода $A^5\Pi-X^5\Pi$ молекулы CrO (полосы $2-0,1-0,0-0,2-2$, $0-1,0-2$). Спектры испускания возбуждались либо при прохождении потока гелия, содержащего CrO_2Cl_2 через безэлектродный МВ-разряд, либо с помощью МВ-разряда в атмосфере аргона над тв. CrO_3 . Выполнен анализ вращательной структуры полос (приводятся волновые числа линий и их отнесение, $I=0-70$) и подтвержден тип перехода. Во всех пяти подполосах наблюдалось значит. Λ -удвоение и большое число небольших локальных вращательных возмущений, к-рые в случае линий с низкими значениями I не позволили проанализировать спектр в рамках обычных методов. При отнесении линий в полосах $0-0$ и $1-0$

спектр
флуоресценц.

2202-11X-068

X. 1980 n 22

в областях, где проявляются возмущения, а также в области кантов этих полос использовался метод спектроскопии лазерной флуоресценции. Состояние $A^5\Pi$ возмущено большим числом др. электронных состояний, к-рые сами не вносят вклада в спектр испусканий. Полученные из спектров лазерного возбуждения доплеровские ширины линий соответствуют т-ре несколько ниже комнатной. Приведены значения молек. констант

T_{-1} , T_0 , T_1 , T_2 , T_3 , B , D , $O+P+q$, $P+2q$, q , A_D , λ_D для состояний $A^5\Pi$ и $X^5\Pi$ (уровни $v=0-2$). Значения равновесных молек. постоянных T_e , ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , α_e (в см^{-1}), $Y_e(A)$ $^{52}\text{Cr}^{16}\text{O}$: состояние $X^5\Pi-0$; 898,50; 6,72; 0,526643; 0,004434; 1,6179; состояние $A^5\Pi-16580,29$; 752,81; 10,12; 0,473712; 0,005483; 1,7059. Значения параметров T_v , A , λ и η (в см^{-1}), описывающих спин-орбитальное расщепление уровней v состояний A и X состояние $X^5\Pi$, $v=0-0$; 62,87; 1,119; $-0,072$; $v=1-884,976$; 62,418; 1,098; $-0,075$; $v=2-1756,568$; 61,936; 1,091; $-0,063$; состояние $A^5\Pi$ $v=0-16502,404$; 54,578; 0,069; $-0,128$; $v=1-17234$; 814; 53,589; 0,022; $-0,105$.

Р. М. Ковба

GrO
UK

Serebrennikov L.V., Mal'nev A.A.
Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim 1980,
21(2), 148-51

IR spectra of products of
reactions of manganese, chro-
mium, and vanadium
with oxygen and nitrous
oxide in an argon matrix.

CA 1980, 92, J24, 206565 W

$\text{Do}(\text{Cr}^+-\text{O})$

1981

Armentrout P. B.,
et al.

J. Am. Chem. Soc. 1981,
103 (21), 6501-6502.

CuO

1981.

Balducci G., et al.

(90)

J. Chem. Soc. Faraday

Trans. II, 1981, 77 (7)
1107-1114



(cu. $\text{CuPO}_2(2); \text{I}$)

CrO^+ [omni 12838] 1981.
Kappes M.D., et al.

(Do) J. Phys. Chem., 1981,
85, 942-944

GrO

Ommuck 13841

1981

Nicholls R.W.,

факторы
Франко-
Кондома

Astrophys. J. Suppl.
Ser., 1981, 44, N3,
279-290.

Cr^+O

1982

2

9 Д249. Реакции Cr^+ , Mn^+ , Fe^+ , Co^+ и Ni^+ с O_2 и N_2O . Исследование зависимости сечений эндотермических реакций от поступательной энергии. Reaction of Cr^+ , Mn^+ , Fe^+ , Co^+ , and Ni^+ with O_2 and N_2O . Examination of the translational energy dependence of the cross sections of endothermic reactions. Armstrong P. B., Halle L. F., Beauchamp J. L. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 5, 2449—2457 (англ.)

Исследована зависимость сечений эндотермич. реакций ионов Cr^+ , Mn^+ , Fe^+ , Co^+ , Ni^+ с молекулами O_2 и N_2O от поступательной энергии. Ионы металлов вытягивались из ионного источника с поверхн. ионизацией, ускорялись, селектировались по скоростям, затормаживались до нужных энергий столкновений и фокусировались в камеру столкновений с O_2 и N_2O при давл. 1—5 · 10⁻³ мм рт. ст. Ионы-продукты и непрореагировавшие

(M)

ф. 1982, 18, v. 9.

MnO^+ , FeO^+ , CoO^+
 NiO^+

ионы детектировались квадрупольным масс-фильтром и электронным умножителем. Все реакции, за исключением $\text{Fe}^+ + \text{N}_2\text{O}$, характеризуются энергетич. порогом E_0 . Найдено, что хорошее совпадение для порогового поведения сечений и термохимич. данных получается в т. наз. модели линии центров Левина и Бернстайна, дающей зависимость $\sigma(E \sim (1 - E_0/E)^n$ с n , равным ~ 1 . Определены величины энергий связи $D(\text{Cr}^+\text{O}) = 3,45$ эВ, $D(\text{MnO}^+) = 2,48$ эВ, $D(\text{FeO}^+) = 3,01$ эВ, $D(\text{CoO}^+) = 2,76$ эВ, $D(\text{NiO}^+) = 1,95$ эВ. А. А. Зембеков



CrO⁺

1982

20 Б910. Реакция Cr⁺, Mn⁺, Fe⁺, Co⁺ и Ni⁺ с O₂ и N₂O. Исследование зависимости сечений эндотермических реакций от поступательной энергии. Armstrong P. B., Halle L. F., Beauchamp J. L. Reaction of Cr⁺, Mn⁺, Fe⁺, Co⁺, and Ni⁺ with O₂ and N₂O. Examination of the translational energy dependence of the cross sections of endothermic reactions. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 5, 2449—2457 (англ.)

Do;

✓
(44)

Техника рассеяния ионного пучка на газовой мишени использована для детального исследования зависимости от поступательной энергии сечений образования двухатомных ионов оксидов переходных металлов в р-циях $M^+ + O_2 \rightarrow MO^+ + O$ и $M^+ + N_2O \rightarrow MO^+ + N_2$, где $M = Cr, Mn, Fe, Co, Ni$. Ионы металлов образовывались в результате ионизации на Пв паров галогидных солей CrCl₃, MnCl₂, FeCl₃, CoCl₂ и NiCl₂. Низкое давл. газовой мишени $(1-5) \cdot 10^{-3}$ мм обеспечивало режим единичных столкновений. Ионные продукты рассеяния де-

X. 1982, 19, N 20

тектировались с помощью квадрупольного масс-фил-
тра. У всех рассмотренных р-ций, за исключением р-ции
 $\text{Fe}^+ + \text{NO}_2$, отмечено наличие энергетич. порога E_0 . Рас-
смотрение функций возбуждения для р-ций O_2 показа-
ло, что наиболее адекватной является классическая
модель жестких шаров $\sigma \sim 1 - E_0/E$, где E — энергия
столкновения. Определенные таким образом энергии
связи для CrO^+ , MnO^+ , FeO^+ , CoO^+ , NiO^+ равны
соотв. $3,45 \pm 0,1$; $2,48 \pm 0,1$; $3,01 \pm 0,1$; $2,76 \pm 0,1$; $1,95 \pm$
 $\pm 0,1$ эВ. Поведение сечения в области высоких энергий
анализируется с учетом возможности образования трех
частиц. Отмечается, что динамич. рассмотрение р-ции
 N_2O требует учета неадиабатич. эффектов.

А. И. Маергойз

CrO

[Ommuck 13656] 1982

Groper D., Wahlgren U.,
et al.

КВ.сек.

расчёт.

Chem. Phys., 1982, 66,
N 3, 459 - 464.



(Cur. Sci., III)

CrO

1982

10 Д420. Разрешенное во времени наблюдение возбужденных атомов и молекул при многофотонной диссоциации. Time resolved observation of excited atoms and molecules in multiphoton dissociation. Schröder H., Lamprecht H., Kompa K. L. — 12 International Quantum Electronics Conference, Munich, 22—25 June, 1982. — «Appl. Phys.», 1982, B28, № 2—3, 180—181 (англ.)

М.П.

Представлены результаты изучения излучательных свойств атомов Cr и молекул CrO в газовой фазе, образующихся при многофотонной диссоциации образцов комплекса CrO_2Cl_2 с помощью излучения лазера на KrF интенсивностью 10 Вт/см^2 . Исследованы разрешенные во времени спектры и проанализированы кинетики затухания люминесценции этих фотопродуктов. Показано, что образование Cr и CrO индуцируется столкновениями. Дан анализ колебательной структуры спектров люминесценции CrO. Сделан вывод о мономолекулярной природе образования возбужденного CrO с двумя дополнительными квантами колебательной энергии. Найдено, что предшествующие образованию Cr и CrO фотопродукты являются разными. Т. А. Ш.

CrO
(H) X

оп. 1982, 18,

N/O.

CrO

Am 17/66

1983

/ 100: 42312s A study of the first ionization potential of the chromium monoxide (X^5II) molecule with high-temperature photoelectron spectroscopy. Dyke, John M.; Gravenor, Brian W. J.; Lewis, Robert A.; Morris, Alan (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, UK SO9 5NH). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1983, 79(7), 1083-8 (Eng). The 1st band in the He I photoelectron spectrum of the $CrO(X^5II)$ mol., obtained via the gas-phase reaction $Cr + O_3$, was recorded. The adiabatic and vertical ionization potentials of the obsd. band were 7.85 and 8.16 eV, resp. Anal. of the obsd. vibrational structure yielded $\bar{\omega}_e = 640 \text{ cm}^{-1}$ and Franck-Condon anal. of the vibrational envelope gave $r_e = 1.79 \text{ \AA}$ for the ground electronic state of the ion, which is predicted on the basis of ab initio configuration-interaction calc's. to be a $^4\Sigma^-$ state.

(y)

(4) ~~X~~ CrO^+ (r_e ,  ω_e , $X^4\Sigma^-$)

C.A. 1984, 100, N6

GO

GO⁺

X217,

помощник.
чекмп

Om. 17166

1983

Dyke J.M., Bravenor
B.W.F., et al.,

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. 2, 1983, 79, N2,
1083 - ● 1088.

AD

[Om. 20391]

1983

Sassenberg U.,

Inaugural dissertation,
Institute of Physics,
University of Stockholm

S-113

46 Stockholm,
1983.

д.ф.н.,
Одбор

GD

[Om. 16924]

1983

Szöke S., Rajulu A.V., et al,

Meop.
paerem

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

AD

DM-20191

1984

5 B1160. Относительные силы полос из анализа распределения интенсивности в системе A—X CrO. Relative band strengths from the study of intensity distribution in the A—X system of CrO. Bagare S. P., Murthy N. Sreedhara. «Physica», 1984, B125, № 2, 265—267 (англ.)

Измерены относит. интегральные интенсивности полос 2—0, 3—1, 1—0, 2—1, 0—0, 1—1, 2—2, 3—3, 0—1, 1—2 перехода $A^5\Pi-X^5\Pi$ в спектре испускания молекулы CrO (дуговой разряд, фотографич. система регистрации с последующим фотометрированием). Приведены значения $\lambda_{v'v''}$, $I_{v'v''}^{\text{относ.}}$ ($I_{\infty}=100$), $S_{v'v''}$ факторы Франка—Кондона и r -центроиды для переходов $v'=0-5$ — $v''=0-5$, использованные для нахождения зависимости электронного момента перехода от межъядерного расстояния. В интервале $1,60 \text{ \AA} < R < 1,72 \text{ \AA}$ $R_e(R) = \text{const} \times (1 - 0,398 R)$.
B. M. Ковба

M.N.

X.1985, 19, N5

CrO

Am. 20 191 1984

101: 200582g Relative band strengths from the study of intensity distribution in the A-X system of chromium(II) oxide. Bagare, S. P.; Murthy, N. Sreedhara (Dep. Phys., Univ. Mysore, Mysore, 570 006 India). *Physica B+C (Amsterdam)* 1984, 125(2), 265-7 (Eng). Relative integrated intensities were measured for 10 bands in the vibrational structure of the astrophys. significant $A^5\Pi-X^5\Pi$ system of CrO by the technique of photog. photometry. Vibrational transition probabilities were computed using the revised mol. consts. of the electronic states. By using these results, the variation of electronic transition moment with the internuclear sepn. was $R_e(r) = \text{const.} \times (1-0.398r)$ in the range $1.60 \text{ \AA} < r < 1.72 \text{ \AA}$. A smoothed array of band strengths is presented.

unmeasured.

$A^5\Pi-X^5\Pi$

C.A. 1984, 101, n22

60

[2m 20 191]

1984

3 Л237. Относительные силы полос по результатам исследования распределения интенсивности в системе $A-X$ молекулы CrO . Relative band strengths from the study of intensity distribution in the $A-X$ system of CrO . Bagare S. P., Murthy N. Sreedhara. «Physica», 1984, B125, № 2, 265—267 (англ.)

Для 10 колебательных полос системы $CrO(A^5\pi-X^5\pi)$, представляющей астрофизич. интерес, методом фотографич. фотометрии определены относительные интегр. интенсивности. Рассчитаны коэф. Франка—Кондона и определена зависимость электронного момента перехода от межъядерного рассеяния $R_e(r) = \text{const}(1-0,398r)$ для $1,60 \text{ \AA} < r < 1,72 \text{ \AA}$. В. С. Иванов

GD

Lom. 21509 / 1984

21 Б1188. Фурье-спектроскопия CrO: вращательный анализ полосы $A^5\Sigma-X^5\Pi(0,0)$ вблизи 8000 см^{-1} . Fourier transform spectroscopy of CrO: rotational analysis of the $A^5\Sigma-X^5\Pi(0,0)$ band near 8000 см^{-1} . Cheung A. S.-C., Zygmicki W., Meger A. J. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 104, № 2, 315—336 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра исследован спектр CrO в области $6000-10000\text{ см}^{-1}$. В спектре низкого разрешения обнаружены три широкие полосы, центрированные при $7200, 81000$ и 9000 см^{-1} , и более слабые полосы при 6300 и 9500 см^{-1} . Полоса вблизи 8000 см^{-1} отнесена к переходу $A^5\Sigma-X^5\Pi(0,0)$ и зарегистрирована с разрешением $0,03\text{ см}^{-1}$. Отнесены и проанализированы пятьдесят ветвей данной полосы. Определены постоянные спин-орбитального взаимодействия и Λ -удвоения в основном электронном состоянии. Показано, что относит. интенсивности ветвей не согласуются с выражениями, полученными для перехода $^5\Sigma-^5\Pi$ в случае типа связи «a» по Гунду. Б. И. Жилинский

М.П.

X. 1984, 19, № 21

CrO

[Ом. 21509] 1984

2 Л207. Фурье-спектроскопия CrO. Вращательный анализ полосы $A^5\Sigma-X^5\Pi$ (0,0) около 8000 см^{-1} . Fourier transform spectroscopy of CrO. Rotational analysis of the $A^5\Sigma-X^5\Pi$ (0,0) band near 8000 см^{-1} . Cheung A. S.-C., Zygmicki W., Meger A. J. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 104, № 2, 315—336 (англ.)

Методом фурье-спектроскопии в ближней ИК-области исследован спектр излучения газообразного CrO. Обнаружено несколько слабых полос в интервале $6000-10000\text{ см}^{-1}$, самая сильная из которых (8000 см^{-1}) приписана переходу (0,0) $^5\Sigma-^5\Pi$. В этой полосе проведено отнесение 50 ветвей, что впервые позволило де-

л-н.

ср. 1985, 18, № 2

тально : охарактеризовать квинтетное электронное состояние молекулы в газовой фазе. Вычислены значения константы спинорбитального взаимодействия и Λ -удвоения. Экспериментальные относит. интенсивности ветвей не согласуются со значениями, вычисленными для чистого перехода $^5\Sigma—^5\Pi$, что говорит о значительном спин-орбитальном замешивании в переходных моментах других переходов.

Е. П. Смирнов

Ord

(DM-20 658)

1984

Mužiraga S., Klobukow-
ski M., et al.,

meopem.
pacem.

Phys. Chem., 1984, 88,
N 21, 4880-4886

CrO

1984

9 Д122. Формулы силы линий для $^5\Sigma-^5\Pi$ -перехода в промежуточном случае. Line strength formulas for $^5\Sigma-^5\Pi$ transition in the intermediate case. Kovács I. «Актуал. пробл. спектроскопии. Материалы симп. ученых соц. стран по нов. пробл. спектроскопии, Москва, 18—22 июня, 1984. М., 1985, 13—17 (англ.)

Развита процедура расчета сил переходов между состояниями $|^5\Sigma_N\rangle$ и $|^5\Pi_N\rangle$, описываемыми случаем Гунда b и промеж. случаем между a и b соответственно, применительно к молекуле CrO. Вычисленные силы линий для 51 ветви 0—0 полосы ($J=20$) находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом.

А. Ф. Шестаков

расчет сил
переходов

Ф. 1985, 18, № 9.

60

1984

17 Б1155. Формула для сил линий перехода $^5\Sigma - ^5\Pi$ в промежуточном случае. Line strength formulas for $^5\Sigma - ^5\Pi$ transition in the intermediate case. Kovács I. «Актуал. пробл. спектроскопии. Материалы симп. ученых соц. стран по нов. пробл. спектроскопии, Москва, 18—22 июня, 1984. М., 1985, 13—17 (англ.)

Приведено общее выражение для сил вращат. линий переходов вида $^5\Sigma$ (b — тип связи по Гунду) — $^5\Pi$ (промежут. тип связи) в двухатомных молекулах (более детально материал публикуется в «Can. J. Phys.», 1984). Сопоставлены вычисленные и эксперимент. силы линий ($I=20$) для 51 ветви полосы 0—0-перехода $A^5\Sigma - X^5\Pi$ молекулы CrO . В. М. Ковба

 $A^5\Sigma - X^5\Pi$

X. 1985, 19, N 17.

60

[Om. 21253]

1984

9 Л194. Формулы для распределения вращательных интенсивностей в переходах $^5\Sigma \leftrightarrow ^5\Pi$ (int) в двухатомных молекулах. Formulae for the rotational intensity distribution of $^5\Sigma \leftrightarrow ^5\Pi$ (int) transitions in diatomic molecules. Kovács I., Antal J. «Can. J. Phys.», 1984, 62, № 12, 1603—1609 (англ.; рез. фр.)

Выведены точные выражения для распределения вращательных интенсивностей в переходах $^5\Sigma \leftrightarrow ^5\Pi$ в случае, когда состояние $^5\Pi$ относится к типу связи, промежуточному между типами *a* и *b* по Гунду. С использованием выведенных ф-л проведены вычисления для перехода $A^5\Sigma \rightarrow X^5\Pi$ в молекуле CrO. Получено хорошее согласие с экспериментом. Е. П. Смирнов.

М.П.

(4) 

фр. 1985, 18, N 9

Двухат. молекулы

вращат. интенс. в переходах $^5\Sigma \leftrightarrow ^5\Pi$ (int)

60

1984

102: 86612k Rotational line strengths in a ${}^6\Sigma - {}^6\Pi$ transition with application to the A - X system of chromium monoxide. Sassenberg, U.; Cheung, A. S. C.; Merer, A. J. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *Can. J. Phys.* 1984, 62(12), 1610-15 (Eng). Detailed calcns. of the line strengths in a ${}^6\Sigma - {}^6\Pi$ transition as a function of J show that the relative branch intensities in the A - X system of CrO, which do not follow the published formulas for ${}^6\Sigma(b) - {}^6\Pi(a)$ transitions, can be explained very well in terms of strong spin uncoupling in the ${}^6\Pi$ state, with a single perpendicular transition moment dominating. It is emphasized that spin uncoupling affects line strengths by an amt. that increases very rapidly with multiplicity, so that algebraic formulas for the pure coupling cases quickly lose their value. An unusual cancellation effect occurs in the main branches of a ${}^6\Sigma - {}^6\Pi$ transition, 9 of which have intensities that drop to zero and then rise again with increasing J .

(A ${}^5\Sigma$ - X ${}^5\Pi$)

C.A. 1985, 102, N10

60

1984

9 Л204. Силы вращательных линий перехода $^5\Sigma-^5\Pi$ применительно к системе $A-X$ молекулы CrO . Rotational line strengths in a $^5\Sigma-^5\Pi$ transition with application to the $A-X$ system of CrO . Sassenberg U., Cheung A. S.-C., Meger A. J. «Can. J. Phys.», 1984, 62, № 12, 1610—1615 (англ.; рез. фр.)

Выполнены детальные расчеты интенсивности вращательных линий для переходов типа $^5\Sigma-^5\Pi$. Результаты расчетов для молекулы CrO свидетельствуют о том, что распределение интенсивности линий системы $A^5\Sigma-X^5\Pi$, которое не подчиняется известным зависимостям для квинтетных переходов типа $^5\Sigma(b)-^5\Pi(a)$, может быть объяснено с учетом отсутствия эффектов спинowego связывания в состоянии $^5\Pi$. Отмечено, что установленный факт имеет весьма общий характер для систем с высокой мультиплетностью, при анализе которых целесообразно использовать численные расчеты интенсивности линий, вместо известных факторов Хёнля — Лондона.

В. А. Е.

спектр,

М.П.

фр. 1985, 18, № 9

CrO

om. 31131

1985

102: 209718] Transition metal oxides: chromium monoxide, molybdenum monoxide, nickel monoxide, palladium monoxide, and silver monoxide. Bauschlicher, Charles W., Jr.; Nelin, Constance J.; Bagus, Paul S. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Chem. Phys.* 1985, 82(7), 3265-76 (Eng). SCF and MC-SCF calcns. showed that the transition metal oxides are quite ionic. Mulliken population analyses for several oxides gave a neg. charge of ~ 0.7 electrons for oxygen. When the transition metal d -shell is only partially filled, the d -orbitals are involved in covalent bonds with O; both two-electron (bonding²-antibonding⁰) and one-electron (bonding²-antibonding¹) bonds are formed. These covalent bonds occur in addn. to the ionic bonding. There is $d\sigma$ -O $2p\sigma$ repulsion; this repulsion is reduced when the $d\sigma$ electron is promoted into an orbital that has dominantly $4sp\sigma$ character and is polarized away from O. This effect is quite large, greater than half and electron, for some states of CrO and MoO.

(meop. pacem)

☒ (44) MoO,  NiO, PdO, AgO

C. A. 1985, 102, N24

GO

[Om. 22168]

1985

Nelin C. J., Bauschlicher

Ch. W., Jr.,

Мерзурце
КОСМОСН.

Chem. Phys. Lett., 1985,
118, N2, 221-225:

60

от. 22 180

1985

2 Д77. Энергия диссоциации молекулы CrO. On the dissociation energy of CrO molecule. Reddy R. R., Reddy A. S. R. «Indian J. Phys.», 1985, B59, № 1, 13—18 (англ.)

Потенциальная кривая для основного $X^5\pi$ -состояния молекулы CrO получена по методу РКРВ в результате подбора пяти параметрич. эмпирич. ф-ции типа Гулберта—Гиршфельдера. В расчетах использованы известная система колебат. уровней молекулы и набор молекулярных постоянных. Предложен модифицированный способ определения точек поворота. Определено значение энергии диссоциации $D_0^0 = 4,311 \pm 0,04$ эВ, согласующееся с характером ионной связи в молекуле. Г. А. Вомпе

И.И., До

ср. 1986, 18, № 2

CrO

вып. 22/80

1985

5 Б1159. Об энергии диссоциации молекулы CrO.
On the dissociation energy of CrO molecule. Red-
dy R. R., Reddy A. S. R. «Indian J. Phys.», 1985, B59,
№ 1, 13—18 (англ.)

Методом Ридберга — Клейна—Риса — Вандерслайса, используя известные молек. постоянные, построена потенциальная кривая молекулы CrO в основном электронном состоянии, $X^5\Pi (V=6-7)$. Приведены значения $G(V)$, $R_{\min}$, $R_{\max}$. Путем аппроксимации полученной потенциальной кривой пятипараметрич. функцией Галбурта — Гершфельдера оценена энергия диссоциации молекулы, $D_0^0(X^5\Pi) = 4,311 \pm 0,04$ эВ. Обсуждены оценки ионности связи в молекуле CrO, сделанные различными методами. В. М. Ковба

М. П., D₀;X. 1986, 19, N5

AD

(DM-22180)

1985

103: 147490p On the dissociation energy of chromium monoxide molecule. Reddy, R. R.; Reddy, A. S. R. (Dep. Phys., KSRM Coll. Eng., Cuddapah, 516 001 India). *Indian J. Phys., B* 1985, 59B(1), 13-18 (Eng). For the ground-state CrO mol., the potential-energy curve and dissociation energy [$D_e = 4.367$ eV; $D_0^0 = 4.311 \pm 0.04$ eV] were obtained in calcns. with the Rydberg-Klein-Rees-Vanderslice method and the Hulbert-Hirschfelder curve-fitting function.

D_0 ;

C.A. 1985, 103, N18

CrO

1986

Bauschlicher Charles
W., Jr., Walch S. P., et al.

Do, xeur.
Ch836,
meop.
pacrim

NATO ASI Ser., Ser.
C 1986, 176, 15-35.

(ceu. CrO; III)

CrO^+

(om. 24541)

1986

Harrison J. F.,

(Re, De
тип осн.
состоян.,
теорет.
расчет)

J. Phys. Chem., 1986,
90, N 15, 3313-3319.

(ссыл. CrF^+ ; III)

GD

[Om. 25119]

1986

Kang H., Beauchamp J. L.,

D;
To

J. Amer. Chem. Soc.,
1986, 108, N 19, ?



GD⁺

[om. 25119]

1986

Kang H., Beauchamp J. L.,

J. Amer. Chem. Soc.,

1986, 108, N19,



60

1986

6 Л186. Интенсивности вращательных линий в переходах $^5\Pi(int) \rightarrow ^5\Pi(int)$. Rotational line strengths in a $^5\Pi(int) \rightarrow ^5\Pi(int)$ transition. Kovács I. «Acta phys. hung.», 1986, 60, № 3—4, 333—338 (англ.)

Получены алгебраич. выражения для интенсивностей вращательных линий полос электронных переходов 2-атомных молекул между состояниями, включающими $^5\Pi$ для промежуточных случаев связи между типами (a) и (b) Гунда. Рассчитанные по этим выражениям интенсивности сравниваются с измеренными в опыте и найденными численным расчетом для молекулы CrO .
М. В. Т.

(м.п.)

ф. 1987, 18, № 6

AD

1986

106: 128039u Rotational line strengths in a ${}^5\Pi(\text{int})-{}^5\Pi(\text{int})$ transition. Kovacs, I. (Dep. At. Phys., Tech. Univ., 1521 Budapest, Hung.). *Acta Phys. Hung.* 1986, 60(3-4), 333-8 (Eng). The algebraic expressions of the line strengths of the branches are compared to the results of the numerical diagonalization computer method applied to the ${}^5\Sigma-{}^5\Pi(\text{int})$ transition of the CrO mol. Explicit algebraic expressions were obtained for the line strengths in the ${}^5\Pi-{}^5\Pi$ transitions where both ${}^5\Pi$ states may belong to the coupling case intermedite between Hund's cases (a) and (b).

C. A. 1987, 106, N 16.

CD

[om. 27370]

1987

Anderson A.B., Grimes R.W.,
Hong S.Y.,

et al.,
Do,
K.E. Alex.
Proc. Chem.

J. Phys. Chem., 1987,
91, N 16, 4245-4250.

CrO Balasubramanian T.K.,
Bhale G.L., et al. 1987

колебаний. Symp.-Int. Astron.
и вращения. Union 1985 (Pub. 1987).
полюсов. 120, 91-2.

(св. ALO; III)

CrO

1987

Dolg M., Wedig U. et al.

Arbeitsber./Inst. Theor.

er. n. Chem. Univ. Stuttgart.

1987, N 26, C. 95-103.

● (cu. SeO; iii)

GD

[om. 26582]

1987

Dolg. M., Wedig U.,
Stoll H., et al.

meopem.
pacrem
M.N.,
We, re, We,
M

J. Chem. Phys., 1987,
86, N4, 2123-31.

GrO

1987

7Д53 ДЕП. Интегралы наложения для молекулы CrO . Назимова Н. А., Жданова Л. В.; Ред. ж. «Изв. вузов. Физ.». Томск, 1987. 6 с. Библиогр. 2 назв. Рус. (Рукопись деп. в ВИНТИ 07.04.87, № 2460-B87)

Найдены интегралы наложения и факторы Франка—Кондона для полос колебательной системы молекулы CrO , соответствующие электронному переходу $B \rightarrow X$. Факторы Франка—Кондона находились методом «упрощенного потенциала». Результаты получены для полос $(0,0)$, $(0,1)$, $(1,0)$, $(0,2)$, $(1,0)$, $(2,0)$, $(3,0)$, $(1,3)$, $(3,1)$ колебательной системы молекулы CrO , соответствующей электронному переходу $B-X$. Автореферат

(М.П.)

ф. 1987, 18, № 7

60

1988

1 Б4025. Исследование реакций атомов Cr и Mo⁻ в ударных волнах / Ахмадов У. С., Заслонко И. С., Смирнов В. Н. // Кинет. и катал.— 1988.— 29, № 4.— 942—943

С помощью техники ударных волн в интервале ~1000—3000 К измерены константы скорости р-ций атомов Cr и Mo с окислителями: NO, NO₂, N₂O, CO₂, SO₂. Оценены прочности связи молекул CrO и MoO.

Резюме

(4) ☒

X. 1989, N1.

CrO
CrO⁺

DM. 29970

1988

11 Д81. Теоретические расчеты параметров двух-
атомных молекул оксидов металлов. CrO и CrO⁺. Theo-
retical calculations of diatomic metal oxides. CrO and
CrO⁺. Jasien Paul G., Stevens Walter J. «Chem.
Phys. Lett.», 1988, 147, № 1, 72—78 (англ.)

В рамках приближения КВ проведены расчеты спек-
троскопич. параметров (равновесного межатомного
расстояния R_e и частоты колебаний ω_e) молекулы CrO
в состоянии $^5\Pi$ и иона CrO⁺ в состояниях $^4\Pi$ и $^4\Sigma^-$.
Во всех расчетах для описания электронов внутренних
оболочек использовались компактные эффективные
потенциалы, записанные в виде гауссовских ф-ций,
параметры которых определялись путем статистич.
обработки релятив. орбиталей Дирака — Фока. В ка-
честве базисных ф-ций использовались оптимизирован-
ные орбитали слэтеровского типа. Получены следую-
щие результаты: для CrO($^5\Pi$) $R_e=1,638$ Å, $\omega_e=$
 $=801$ см⁻¹; для CrO⁺($^4\Pi$) $R_e=1,622$ Å, $\omega_e=895$ см⁻¹;
для CrO⁺($^4\Sigma^-$) $R_e=1,638$ Å, $\omega_e=801$ см⁻¹.

В. М. Стрельченя

М.П.

ф. 1988, 18, N 11

CrO
CrO⁺

Ом. 29970

1988

21 Б1027. Теоретические расчеты двухатомных оксидов металлов. CrO и CrO⁺. Theoretical calculations of diatomic metal oxides. CrO and CrO⁺. Jasien P. G., Stevens W. J. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 147, № 1, 72—78 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия с учетом однократных и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям рассчитаны потенциальные кривые состояния ⁵Π молекулы CrO и состояний ⁴Σ⁻ и ⁴Π иона CrO⁺. Орбитали получены многоконфигурац. методом ТСП в полном активном пространстве. Использован релятивистский основной Пт для Cr и валентный базис слейтеровских ф-ций 4s4p3d1f на Cr и 4s4p2d на O. Состояния ⁴Π и ⁴Σ⁻ CrO⁺ имеют близкие энергии (энергия состояния ⁴Π на ~1000 см⁻¹ выше). Определены равновесные межъядерные расстоя-

М.А.

Х. 1988, 19, № 21

ния (1,647, 1,622 и 1,638 Å), колебат. частоты (850, 295 и 801 см⁻¹) и энергии диссоциации (4,00, 2,84 и 2,94 эВ) для состояния ⁵Π СгО и состояний ⁴Π и ⁴Σ-СгО⁺ соотв. На основе хорошего согласия теорет. и эксперим. данных для СгО и их существенного различия для СгО⁺ сделан вывод о необходимости повторного анализа эксперим. фотоионизац. спектра СгО.

А. А. Сафонов

CrO
CrO⁺

On 29970

1988

109: 135343d Theoretical calculations of diatomic metal oxides. Chromium oxide (CrO) and oxochromium(1+) (CrO⁺). Jasien, Paul G.; Stevens, Walter J. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bur. Stand., Gaithersburg, MD 20899 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 147(1), 72-8 (Eng). Large-scale MR-CI calcs. were carried out on the electronic structures and spectroscopic consts. of the ⁴Π state of the CrO and the ⁴Π and ⁴Σ⁻ states of the CrO⁺ ion. The results for the R_e and ω_e (1.647 Å, 850 cm⁻¹) for CrO agree with exptl. detd. values. In the case of CrO⁺, the ⁴Π and ⁴Σ⁻ states lie close in energy. The calcd. results for the R_e and ω_e for the ⁴Π (1.622 Å, 895 cm⁻¹) and the ⁴Σ⁻ (1.638 Å, 801 cm⁻¹) states are in poor agreement with those of expt., but are consistent with those of another ab-initio calcn. In view of this, a reanal. of the exptl. spectrum might be in order.

неопет. павет
хукух хекр.
состолх.

C. A. 1988, 109, N 16.

GD

[Dm. 32 165]

1989

Devore T.C., Gole F.L.,

Впрахування.

Phys. Chem. Phys., 1989, 133,

Журнал №1, 95-102.

Содерж.

Formation of the low-
lying electronic states of

RO in highly exothermic
reactive oxidation.

Assessment of new states
and partial resolution
of previous observations

GD

(OM 32512)

1989

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

Spectrochimica Acta Col-
lor Jubilee Symposium

& June 27-28, 1989.

Spectroscopy Beyond Mo-
lecular ● Constants.

CrO

1989

Merer A.J.

Annu. Rev. Phys. Chem.

(одзор)
и.н.

Vol. 40: Palo Alto (Calif.),
1989. c. 407-438.

(cur. ● MnO ; III)

60

1989

8 Б1196. Постоянный электрический дипольный момент монооксида хрома. The permanent electric dipole moment of chromium monoxide / Steimle T. C., Nachman D. F., Shirley J. E., Bauschlicher C. W., Langhoff S. R. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 4.— С. 2049—2053.— Англ.

При использовании суб-доплеровской оптич. техники перемодулированной флуоресц. спектроскопии совместно с эффектом Штарка определен постоянный дипольный момент молекулы CrO в газовой фазе в состоянии $X^5\Pi$ ($\Omega=-1, v=0$) 3.88 ± 0.13 D и в состоянии $B^5\Pi$ ($\Omega=-1$) 4.1 ± 1.8 D. Неэмпирич. расчет методом МСКВ совместно с итерациями в НО и вычислениями в конечном поле для состояния $X\Pi$ дали значение 3.80 ± 0.3 D.
Н. В. Кулакова

X. 1990, № 8

CrO⁺

(DM-32428)

1989

Takahara Y., Yamaguchi K.,
et al.,

потенц.
кривые,
кв. мех.
расчет.

Chem. Phys. Lett., 1989,
158, N1-2, 95-101.

60

1992

№ 9 Б1093. Вращательная структура электронного перехода $A'^5\Delta - X^5\Pi$ CrO. Rotational structure of the $A'^5\Delta - X^5\Pi$ electronic transition of CrO /Barnes Mark, Hajigeorgiou Photos G., Merer Anthony J. //47th Ohio State Univ. Int. Symp. Mol. Spectrosc., Columbus, Ohio, June 15—19, 1992 .—Columbus (Ohio), 1992 .—С. 115 .—Англ.

В ближней ИК-области с разрешением ограниченным доплеровским уширением измерен спектр лазерной ФЛ молекул CrO, связанный с переходом $A'^5\Delta - X^5\Pi$. Для возбуждения использовали перестраиваемый кольцевой лазер на красителе. Выполнен анализ вращат. структуры полосы 0—0. В результате совместной обработки данных по полосам 0—0-переходов $A'^5\Delta - X^5\Pi$ и $A^5\Sigma^+ - X^5\Pi$ получен улучшенный набор молек. постоянных CrO в состояниях $X^5\Pi$, $A^5\Sigma^+$ и $A'^5\Delta$. В. М. Ковба

М.П.

Х. 1993, №9

620

[om. 37459]

1992

Bloomberg M.A.A., Siegbahn Per E.M.,

(90) Theor. Chim. Acta 1992,
81, 363-374

620

1993

119.36576g Rotational analysis of the $A'^5\Delta-X^5\Pi$ transition of chromium monoxide. Barnes, M.; Hajigeorgiou, P. G.; Merer, A. J. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Z1). *J. Mol. Spectrosc.* 1993, 160(1), 289-310 (Eng). Laser excitation spectra of the $A'^5\Delta-X^5\Pi$ (0,0) and (1,1) bands of CrO were recorded in the region 11,750-12,000 cm^{-1} . Each band was found to consist of five distinct subbands, corresponding to the five case (a) allowed spin components of a $^5\Delta-^5\Pi$ transition. The present data are combined with FTIR emission data for the $A^5\Sigma^+-X^5\Pi$ (0,0) band system recorded by A. S-C. Cheung et al. (1984), enabling the detn. of improved mol. consta. for the $X^5\Pi$ and $A^5\Sigma^+$ states as well as the first set of reliable consta. for the $A'^5\Delta$ state. Several rotational perturbations in the upper $A'^5\Delta$ are noted. Possible candidates for the perturbing states are discussed.

($A'^5\Delta-X^5\Pi$)

C. A. 1993, 119, N4

CrO

1995

Bauschlicher Ch. W., Jr.,
Maitre Ph.

u. n., ξe ,
We, Do,
meop.
pacrẽm

Theor. Chim. Acta
1995, 90 (2/3), 189-203.

(see.  ScO; III)

1996

F: CrO

P: 3

9Б124. Исследование свойств двухатомных оксидов переходных металлов первого ряда в основном и низколежащих возбужденных состояниях в рамках улучшенного приближения атомной суперпозиции и электронной делокализации метода MO. Ground and low-lying excited state properties of the first-row transition-metal oxide diatomics calculated by an improved ASED-MO model / Bakalbassis Evangelos G., Stiakaki Aglaia D., Tsipis Athanasios C., Tsipis Constantinos A. // Chem. Phys. - 1996. - 205, N 3. - С. 389-399. - Англ.

РЖХ 1997

60

OM 38432

1996

У 19Б1187. Ультрафиолетовая фотоэлектронная спектроскопия отрицательного иона оксида хрома. Ultraviolet negative-ion photoelectron spectroscopy of the chromium oxide negative ion / Wenthold Paul G., Gunion Robert F., Lineberger W. C. // Chem. Phys. Lett.— 1996.— 258, № 1-2.— С. 101-106.— Англ.

Обнаружено четыре электронных состояния CrO . Основное $^5\pi$ -состояние имеет сродство к электрону $1,221 \pm 0,006$ эВ. Возбужденное $^3\pi$ -состояние на 8600 ± 40 см^{-1} выше основного состояния. Два других состояния CrO , предполагаемые триплетными, наблюдались при энергиях, равных 4835 ± 80 и 7365 ± 40 см^{-1} .

Г. К.

М.А.

X. 1997, N 19

(38748)

1997

CrO

O CrO, CrOO

CrO₃, Cr₂O₃Cr₂O₃, Cr₂O₄

UK 8

MAMPAGE

A

(45)

C.A/1997/127N21

127: 300483f Reactions of laser-ablated chromium atoms with dioxygen. Infrared spectra of CrO, OCrO, CrOO, CrO₃, Cr(OO)₂, Cr₂O₂, Cr₂O₃ and Cr₂O₄ in solid argon. Chertihin, George V.; Bare, William D.; Andrews, Lester (Department Chemistry, University Virginia, Charlottesville, VA 22901 USA). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(8), 2798-2806 (Eng), American Institute of Physics. Reactions of laser-ablated Cr atoms with O₂ gave a very strong, sharp 965.4 cm⁻¹ band and weak, sharp 1869.7, 984.3, 914.4, 846.3, 716.2, and 643.1 cm⁻¹ bands. The 1869.7, 965.4, and 914.4 cm⁻¹ bands track together on annealing, show ⁵²Cr, ⁵³Cr, ⁵⁴Cr isotopic splittings appropriate for a single Cr atom and triplets with statistical ^{16,18}O₂ for two equiv. O atoms, and are assigned to the $\nu_1 + \nu_3$, ν_3 and ν_1 modes of the bent (128°±4°) chromium dioxide OCrO mol. The 984.3 cm⁻¹ band shows chromium isotopic splittings for two Cr atoms and ^{16,18}O₂ components for two O atoms, and is attributed to the bent CrOCrO mol. The weak 846.3 cm⁻¹ band exhibits proper oxygen isotopic behavior for CrO and is red shifted 39 cm⁻¹ from the gas-phase value, the max. shift obsd. for a first row transition metal monoxide. The sharp 716.2 and 643.1 cm⁻¹ bands track together; the former reveals Cr isotopic splittings for two Cr atoms and the latter ^{16,18}O₂ splittings for two sets of dioxygen subunits; the branched-puckered-ring dimer O(Cr₂O₂)O is identified. Annealing produces new bands due to CrOO, CrO₃, Cr(OO)₂ and the ring dimers (Cr₂O₂) and (Cr₂O₂)O, which are identified from isotopic shifts and splitting patterns.

CrO

[Om 38748]

1997

OCrO

George V. Chestikin,

CrOO

William D. Bare et al.,

CrO₃

J. Chem. Phys., 1997,

107(8), 2798-2806.

UK

CRXMP



CrO^+

(OM. 39173)

1997

CrO^-

Evangelos G. Bakalbassis
Maria-Aglaia D. Stiakaki
et al.

Do;
Heugr. Chem. Phys., 1997, 169-182
Ground and excited
state properties first-row
transition -  metal oxidi
diatomics calculated

by an improved ASED-MO model.

1997

60

127: 300619e Measurement of the radiative lifetime of the $\text{CrO}(\text{B}^5\Pi_{\Omega}, \nu = 0)$ state. Hedgecock, Ian M.; Naulin, Christian; Costes, Michel (UA 348 CNRS, Photophysique et Photochimie Moléculaire, Université Bordeaux I, 33405 Talence, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1997, 184(2), 462-463 (Eng), Academic. Measurement of the radiative lifetimes of the $\text{CrO}(\text{B}^5\Pi_{\Omega}, \nu = 0)$ state were obtained by pulse-decay methods in a collisionless environment. The fluorescence decay of the $\text{B}^5\Pi_1$ state shows a good fit over 4 radiative lifetimes. Thus, $\tau(\text{B}^5\Pi_1, \nu = 0) = 134.9 \pm 9.2$ nsec is significantly larger than $\tau(\text{B}^5\Pi_{-1}, \nu = 0) = 118.3 \pm 4.4$ nsec and $\tau(\text{B}^5\Pi_0, \nu = 0) = 121.0 \pm 8.0$ nsec.

$$(\text{B}^5\Pi - \tilde{\tau})$$

C.A. 1997, 127, N21

CrO

$\boxed{\text{Am. 39367}}$

1998

Cr_2O_3

CrO_2

J. Phys. Chem., 1998, B,
102, 17, 1126-35

u.a.,

ΔH

1993

F: CrO

P: 3

131:357735 RKR potential energy curves,
dissociation energies, .gamma.- centroids and
Franck-Condon factors of YO, CrO, BN, ScO, SiO and
AlO mole Reddy, R. R.; Ahammed, Y. Nazeer;
Gopal, K. Rama; Azeem, P. Abdul; Anjaneyulu, S.
Department of Physics, Sri Krishnadevaraya
University Anantapur 515 003, India
Astrophys. Space Sci., Volume Date 1998-
1999, 262(2), 223-240 (English) 1999 The potential
energy curves for the electronic ground states of
astrophys important YO, CrO, BN, ScO, SiO and AlO
mols. are constructed techniques the 5-parameter
Hulburt-Hirschfelder function. The estd. dissocn.

energi 7.235 $\pm$ 0.15, 4.337 $\pm$ 0.09, 3.917 $\pm$ 0.09, 6.899 $\pm$ 0.14, 8.181 $\pm$ 0.17 and 5.202 $\pm$ 0.11 eV for YO, CrO, BN, ScO, SiO and AlO, resp. The D0 values are in reasonably good agreement with literature values. The r Centroids and Franck-Condon factors for the bands of B2.SIGMA.+ - X2.SIGM YO, B5.pi. - X5.pi. of CrO, A3.pi. - X3.pi. of BN, B2.SIGMA.+ - X2.SIGMA. ScO, E1.SIGMA.+ - X1.SIGMA.+ of SiO and D2.SIGMA.+ - X2.SIGMA.+ and B2.SI X2.SIGMA.+ of AlO mols. were detd. The Franck-Condon factors are evaluat the approx. anal. method of Jarman and Fraser. The absence of the bands these systems is explained.

GD

(DM. 40348)

2010

Lester Andrews et al.,

J. Phys. Chem. A 2000,
104, 8173 - 8177

Laser Desorption/Ionization of
Transition Metal Atoms

and Oxides from solid Argon.

CrD

(Om. 40186)

2070

Kuawuu
n. coomatt.
2, Do, We,
neopem.
pacem

Adam J. Bridgeman[†]
and Joanne Rothery,
J. Chem. Soc. Dalton
Trans. 2000, N2, 211-213

2000

F: CrO-

P: 3

133:64224 Electronic Structure of the 3d Metal
Monoxide Anions. Gutsev, Gennady L.; Rao, B. K.;

Jena, P. Physics Department, Virginia Commonwealth
University Richmond, VA 23284-2000, USA J. Phys.

Chem. A, 104(22), 5374-5 (English) 2000 The
electronic and geometrical structure of the ground and
excited state of the 3d metal monoxide anions were calcd.
using d. functional theory and different formulations of
generalized-gradient approxns. for the exchange
correlation potential. The anion states with low- and

high-spin multipli with respect to the ground-state spin multiplicities of the corresponding neutral parents are stable toward autodetachment of the extra electron. low-spin multiplicity anion states are more stable than the high-spin one except for that of CrO^- , whose ground state appears to be a high-spin multiplicity state. Computed electron affinities of the neutral monoxide in good agreement with the exptl. values obtained by laser photoelectron spectroscopy. Pure d. functional methods are generally superior to a hyb Hartree-Fock d.-functional-theory approach, except for reproducing bond r energies.

Qm. 40723

2001

F: CrO⁺

P: 3

134:357754 **Theoretical study of first-row transition metal oxide cations.** Nakao, Yoshihide; Hirao, Kimihiko; Taketsugu, Tetsuya. Graduate School of Engineering, Department of Applied Chemistry, The University of Tokyo, Bunkyo-ku, Tokyo, Japan. J. Chem. Phys. (2001), 114(18), 7935-7940. in English.

The equil. geometries, dissocn. energies, and electronic structures of the ground and low-lying excited states for the first-row transition metal oxide cations, MO⁺ (M = Sc to Zn), were studied using the multireference singles and doubles CI (MR-SDCI) and the multireference second-order Moller-Plesset methods. To investigate the applicability of the d. functional theory (DFT) to an electronic structure

exchange functional with the one-parameter progressive correlation functional (BOP), and the Becke three-parameter hybrid exchange functional with the Lee-Yang-Parr correlation functional (B3LYP) methods were also applied. The DFT predicts the ground state M-O bond lengths in good agreement with the multireference-based methods except for MnO^+ and CuO^+ , which have a multiconfigurational electronic structure. With respect to the dissociation energies, the B3LYP results are in good agreement with the multireference-based methods, while the DFT with pure functionals overestimates the energetics by about 20 kcal/mol compared to the MR-SDCI method.

ORD - [Om. 41399]

2002

Charles W. Auschlicher, Jr.,
Butsev F.d.,

J. Chem. Phys., 2002,

116, N 9, 3659-3661.

A new interpretation of the

CrD⁻ photoelectron detachment spectra