

Ab Initio calculations of the spectra and lifetimes of the Lead dimer

Lidan Xiao¹, Boris F. Minaev^{23*}, Hans Ågren³, Bing Yan^{a*}

¹*Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China;*

²*Department of Chemistry and Nanomaterials Science, Bohdan Khmelnytsky National University, 18031Cherkasy,Ukraine*

³*Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, 752 36 Uppsala, Sweden*

Table S1a. The potential energy curves of the Λ -S states for $\text{Pb}_2(\text{cm}^{-1})$.

R(Å)	$b^1\Sigma_g^+$	$a^1\Delta_g$	$d^1\Sigma_g^+$	$c^1\Pi_u$	$1^1\Pi_g$	$1^1\Sigma_u^-$	$1^5\Sigma_g^+$	$2^5\Sigma_g^+$	$1^5\Pi_u$
1.601	278903	329425	333944	303033	330803	322990	345370	355134	366586
1.701	181810	223638	227970	201765	231803	222620	244021	252519	265656
1.801	119009	153378	157565	135319	167654	157418	176304	184389	197821
1.85	96641	127668	131797	111320	143679	133153	151174	159966	169884
1.9	78124	105870	109941	91205	123033	113258	130414	140047	147186
1.95	63088	87788	91811	74661	104514	96909	113141	123711	128228
2	50903	72725	76706	61049	89164	83446	98726	110345	112281
2.05	41052	60151	64095	49845	76535	72345	86649	99429	98801
2.1	33115	49632	53545	40618	65989	63176	76500	90531	87357
2.15	26745	40816	44705	33020	57118	55589	67945	83304	77602
2.2	21673	33378	37254	26717	49562	49265	60711	77446	69214
2.25	17676	27241	31117	21680	43342	43965	54594	72793	62043
2.301	14462	22013	25900	17512	38000	39218	49301	69020	55742
2.35	12040	17828	21752	14270	33665	34969	44968	66139	50510
2.4	10117	14303	18298	11643	29963	30900	41191	63823	45894
2.45	8631	11421	15541	9598	26879	27235	37967	61940	41904
2.5	7492	9110	13423	8070	24340	24041	35219	59763	38467
2.5501	6645	7337	11928	7032	22318	21331	32899	54998	35542
2.6	5914	5899	10864	6248	20567	19004	30904	51313	32978
2.65	5297	4778	10206	5724	19169	17025	29197	48190	30744
2.701	4778	3922	9870	5412	17975	15328	27680	45374	28762
2.75	4423	3367	9811	5320	17077	13994	26423	42852	27142
2.79	4202	3042	9885	5340	16458	13061	25516	41044	25955
2.85	4021	2776	10166	5533	15732	11924	24344	38575	24417
2.9	3996	2726	10504	5809	15278	11189	23510	36722	23326
2.95	4075	2805	10906	6169	14940	10616	22790	35033	22382
3	4243	2991	11349	6593	14696	10186	22167	33492	21566
3.05	4487	3270	11812	7067	14534	9879	21625	32078	20861
3.102	4809	3634	12302	7594	14430	9670	21135	30740	20231
3.15	5154	4025	12745	8096	14380	9565	20738	29609	19729
3.2	5553	4477	13193	8630	14367	9530	20372	28530	19274
3.25	5983	4962	13618	9165	14382	9560	20049	27540	18881
3.3	6438	5474	14020	9694	14424	9646	19764	26631	18543
3.35	6909	6003	14395	10214	14481	9778	19509	25799	18252
3.4	7390	6543	14740	10717	14553	9949	19283	25038	18001
3.451	7887	7100	15063	11213	14637	10153	19079	24324	17780
3.5	8364	7633	15341	11667	14720	10377	18901	23694	17600
3.55	8848	8173	15600	12106	14812	10623	18739	23106	17442
3.6	9326	8704	15831	12521	14905	10882	18594	22569	17308
3.65	9793	9222	16035	12909	14997	11154	18462	22075	17196

3.701	10259	9740	16221	13278	15089	11439	18341	21614	17099
3.75	10691	10217	16377	13605	15179	11716	18236	21208	17022
3.8	11117	10688	16520	13915	15267	11999	18140	20830	16957
3.85	11526	11141	16645	14200	15352	12280	18052	20486	16904
3.91	11995	11654	16774	14512	15451	12615	17960	20110	16856
3.94	12219	11900	16832	14657	15515	12833	17916	19939	16832
4	12648	12370	16935	14922	15594	13100	17839	19623	16810
4.1	13305	13085	17077	15308	15743	13614	17729	19171	16788
4.202	13900	13730	17189	15638	15890	14101	17644	18798	16790
4.301	14410	14279	17279	15910	16024	14534	17578	18504	16810
4.4	14857	14755	17352	16140	16151	14926	17527	18269	16845
4.5	15250	15174	17411	16338	16274	15282	17488	18078	16886
4.6	15589	15532	17459	16507	16388	15598	17457	17929	16935
4.7	15879	15839	17499	16652	16494	15872	17435	17810	16985
4.8	16126	16098	17529	16774	16590	16112	17418	17718	17036
4.9	16335	16316	17554	16880	16678	16318	17402	17646	17082
5.01	16527	16518	17573	16976	16766	16511	17389	17582	17130
5.1	16659	16654	17582	17042	16829	16645	17382	17543	17165
5.201	16784	16783	17591	17106	16893	16772	17374	17507	17200
5.3	16889	16884	17593	17156	16948	16878	17367	17479	17231
5.4	16978	16970	17593	17200	16998	16968	17365	17459	17259
5.5	17051	17040	17591	17238	17042	17042	17360	17442	17281
5.6	17112	17099	17589	17268	17082	17106	17358	17428	17303
5.7	17162	17148	17582	17295	17117	17159	17358	17420	17321
5.8	17204	17187	17578	17317	17148	17202	17358	17411	17336
5.9	17239	17222	17571	17334	17176	17240	17360	17407	17352
6	17268	17251	17565	17352	17200	17273	17363	17404	17365
7	17413	17398	17527	17450	17371	17437	17411	17428	17453
8	17467	17457	17521	17503	17461	17499	17459	17470	17505
9	17489	17481	17516	17527	17503	17525	17483	17490	17529
10	17496	17492	17512	17536	17523	17536	17492	17499	17538

Table S1b. The potential energy curves of the Λ -S states for $\text{Pb}_2(\text{cm}^{-1})$.

R(Å)	$1^5\Delta_u$	$1^5\Delta_g$	$1^5\Sigma_u^-$	$A^3\Pi_u$	$X^3\Sigma_g^-$	$1^3\Sigma_u^+$	$2^3\Sigma_u^+$	$D^3\Pi_g$	$1^3\Delta_u$
1.601	351517	333924	351001	297272	324070	312317	358764	330588	317938
1.701	250232	228868	247199	197099	218610	212480	254703	232283	218728
1.801	184453	159731	179096	130585	148613	147101	185785	164597	152963
1.85	160032	133675	153516	106559	123020	123514	160416	138653	129224
1.9	140115	112092	132405	86447	101329	103765	137479	117136	109333
1.95	123779	94172	114875	69900	83348	87544	117948	99253	92985
2	110413	79235	100300	56293	68384	74198	101468	84342	79529
2.05	99497	66753	88174	45102	55902	63213	87520	71878	68437
2.1	90599	56302	78122	35897	45473	54164	75681	61431	59291
2.15	83372	47534	69872	28332	36744	46711	65608	52659	51743
2.2	77514	40140	63626	22095	29388	40579	57781	45245	45510
2.25	72861	33994	57658	17095	23335	35553	50475	39088	40388
2.301	69088	28747	52768	12962	18192	31339	44049	33823	36055
2.35	66207	24520	48932	9756	14090	28007	38764	29576	32561
2.4	63889	20920	45447	7159	10653	25207	34163	25955	29493
2.45	62002	17940	42295	5144	7864	22907	30257	22950	26736
2.5	59813	15497	39260	3639	5645	21019	26978	20490	24153
2.5501	55020	13557	36090	2616	3968	19487	24291	18530	21728
2.6	51333	11948	33795	1857	2625	18137	22097	16900	19566
2.65	48219	10649	31879	1363	1600	16908	20378	15572	17712
2.701	45409	9598	30219	1086	843	15736	19075	14492	16061
2.75	42894	8845	28740	1036	393	14714	18199	13713	14749
2.79	41088	8351	27750	1091	147	13941	17674	13197	13825
2.85	38619	7822	26444	1339	0	12942	17132	12633	12694
2.9	36769	7541	25501	1666	48	12262	16840	12321	11959
2.95	35079	7385	24671	2083	228	11720	16654	12128	11384
3	33538	7333	23936	2572	516	11301	16544	12036	10950
3.05	32127	7368	23286	3117	895	10991	16494	12029	10638
3.102	30786	7480	22687	3727	1365	10776	16483	12091	10425
3.15	29655	7636	22198	4310	1855	10660	16502	12198	10315
3.2	28576	7842	21741	4934	2410	10612	16540	12352	10278
3.25	27586	8085	21333	5568	2998	10627	16590	12536	10304
3.3	26677	8358	20964	6205	3615	10695	16652	12743	10388
3.35	25845	8654	20635	6839	4247	10811	16715	12967	10517
3.4	25082	8966	20334	7464	4892	10965	16783	13199	10686
3.451	24368	9297	20058	8092	5557	11154	16851	13441	10893
3.5	23741	9622	19816	8680	6196	11360	16913	13671	11114
3.55	23150	9960	19593	9262	6843	11590	16976	13904	11360
3.6	22612	10296	19386	9824	7482	11836	17033	14128	11623
3.65	22119	10634	19197	10364	8110	12095	17086	14343	11896

3.701	21658	10972	19020	10888	8735	12365	17137	14551	12181
3.75	21252	11292	18862	11367	9319	12629	17180	14740	12460
3.8	20874	11612	18715	11830	9896	12896	17222	14922	12743
3.85	20527	11924	18579	12264	10451	13164	17257	15091	13026
3.91	20152	12286	18429	12749	11090	13482	17297	15280	13359
3.94	19926	12521	18337	12978	11395	13636	17317	15368	13522
4	19665	12804	18232	13403	11979	13939	17349	15534	13840
4.1	19215	13340	18047	14027	12872	14417	17398	15782	14343
4.202	18840	13840	17892	14560	13669	14861	17439	16002	14808
4.301	18546	14281	17771	14992	14338	15245	17477	16191	15214
4.4	18311	14681	17674	15350	14905	15583	17510	16357	15570
4.5	18120	15041	17600	15651	15379	15879	17538	16507	15881
4.6	17971	15361	17540	15901	15767	16131	17562	16636	16149
4.7	17852	15644	17497	16112	16079	16344	17584	16750	16373
4.8	17760	15890	17464	16289	16331	16522	17600	16851	16559
4.9	17685	16103	17439	16441	16531	16676	17611	16937	16713
5.01	17624	16305	17420	16579	16706	16814	17619	17018	16853
5.1	17584	16445	17407	16678	16823	16906	17622	17075	16946
5.201	17547	16581	17398	16772	16928	16994	17622	17130	17033
5.3	17521	16695	17391	16851	17011	17062	17619	17174	17104
5.4	17499	16794	17387	16919	17080	17121	17615	17213	17161
5.5	17481	16878	17385	16979	17137	17167	17608	17246	17207
5.6	17468	16948	17385	17029	17183	17207	17602	17273	17246
5.7	17459	17009	17385	17073	17222	17240	17593	17297	17279
5.8	17453	17062	17387	17112	17253	17266	17587	17317	17306
5.9	17448	17108	17389	17145	17281	17288	17578	17334	17330
6	17444	17145	17391	17176	17303	17308	17569	17349	17347
7	17468	17367	17448	17365	17435	17413	17523	17446	17455
8	17510	17461	17499	17457	17494	17464	17516	17499	17503
9	17529	17505	17525	17499	17521	17483	17514	17523	17525
10	17538	17523	17534	17518	17529	17492	17507	17532	17534

Table S2a. The potential energy curves of the Ω states for $\text{Pb}_2(\text{cm}^{-1})$.

R(Å)	$\chi^0_g^+$	$b^1_{\Sigma_{g,0}^+}$	$a^1_{\Delta_{g,2}}$	R(Å)	$2u(I)$	$1_u(I)$	$0_u^-(I)$	$0^+u(I)$	$1_u(II)$
1.601	288060	324683	334235	1.701	201021	201503	208704	210265	211639
1.701	191060	219684	229523	1.801	134773	135368	142370	143706	145336
1.801	128348	150058	159650	1.850	110876	111537	118395	119635	121383
1.9	87506	102784	112053	1.900	90896	91577	98337	99469	101322
1.95	72433	84844	93973	1.950	74546	75276	81826	82884	84828
2	60197	69946	78900	2.000	61058	61773	68161	69204	71160
2.05	50267	57500	66266	2.050	49981	50676	56906	57938	59895
2.1	42195	47146	55671	2.100	40889	41564	47643	48660	50610

2.15	35532	38654	46780	2.150	33429	34079	40030	41017	42954
2.2	29634	32075	39272	2.200	27267	27881	33775	34711	36606
2.25	24130	27483	33078	2.250	22357	22955	28786	29612	31518
2.301	19224	24042	27816	2.301	18270	18832	24696	41734	27263
2.35	15227	21495	23606	2.350	15094	15622	21544	22092	23932
2.4	11859	19464	20051	2.400	12519	13012	18943	19411	21208
2.45	9121	17882	17076	2.450	10513	10969	16875	17312	19061
2.5	6940	16654	14742	2.501	9011	9429	15288	15725	17424
2.55	5281	15731	12946	2.550	7981	8352	14167	14625	16287
2.6	3935	14951	11503	2.600	7210	7532	13298	13792	15402
2.65	2788	14150	10503	2.650	6690	6958	12680	13222	14765
2.701	2010	14045	9527	2.701	6365	6585	12271	12864	14303
2.75	1392	13682	8899	2.750	6257	6423	12089	12726	14048
2.79	841	13440	8447	2.790	6298	6379	12036	12703	14006
2.85	265	12887	7988	2.850	6483	6480	12130	12821	13982
2.95	0	12313	7807	2.950	7110	6969	12349	13303	13369
3	71	12179	7899	3.000	7535	7300	11968	13632	12943
3.05	230	12123	8089	3.050	8013	7668	11436	13994	12559
3.102	468	12130	8359	3.102	8546	8068	10921	14376	12246
3.15	736	12181	8661	3.150	9058	8436	10621	14715	12093
3.2	1053	12268	9018	3.200	9603	8807	10435	15043	12045
3.25	1396	12383	9408	3.250	10154	9159	10334	15338	12085
3.3	1757	12517	9821	3.301	10711	9476	10294	15580	12197
3.35	2121	12664	10251	3.350	11244	9779	10301	15812	12365
3.4	2487	12818	10689	3.400	11771	10047	10345	15993	12581
3.451	2882	12977	11138	3.451	12290	10293	10420	16146	12837
3.5	3241	13131	11567	3.500	12767	10509	10513	16270	13105
3.55	3597	13287	11997	3.550	13228	10711	10625	16377	13392
3.6	3940	13448	12416	3.600	13660	10897	10750	16470	13686
3.65	4268	13636	12820	3.650	14059	11068	10883	16552	13982
3.701	4586	13447	13215	3.701	14434	11229	11024	16626	14279
3.75	4873	13612	13574	3.750	14762	11372	11163	16692	14557
3.8	5149	13728	13920	3.800	15066	11507	11305	16755	14832
3.85	5406	13817	14244	3.850	15342	11631	11446	16816	15097
3.91	5692	13901	14603	3.910	15632	11768	11613	16887	15399
3.94	5834	13947	14771	3.940	15769	11831	11711	16922	15544
4	6074	13995	15074	4.000	16017	11952	11853	16995	15821
4.1	6440	14067	15518	4.100	16367	12131	12105	17116	16239
4.202	6757	14117	15919	4.202	16660	12291	12340	17242	16610
4.301	7019	14152	16226	4.301	16919	12429	12547	17364	16868
4.4	7241	14180	16481	4.400	17059	12548	12719	17484	17191
4.5	7432	14203	16694	4.501	17222	12658	12888	17600	17412
4.6	7593	14225	16871	4.600	17360	12756	13036	17710	17594

4.7	7730	14246	17018	4.700	17477	12842	13163	17811	17746
4.8	7841	14265	17145	4.800	17577	12917	13272	17903	17871
4.9	7939	14284	17245	4.900	17663	12981	13363	17985	17974
5.01	8028	14303	17334	5.010	17742	13041	13446	18066	18065
5.1	8089	14318	17395	5.100	17797	13083	13504	18127	18122
5.201	8147	14334	17453	5.201	17851	13123	13559	18184	18179
5.3	8194	14349	17500	5.300	17902	13157	13604	18230	18228
5.4	8233	14362	17539	5.400	17942	13185	13642	18274	18265
5.5	8266	14374	17571	5.500	17976	13210	13674	18312	18295
5.6	8294	14386	17599	5.600	18006	13231	13701	18346	18319
5.7	8318	14397	17621	5.700	18032	13248	13724	18376	18338
5.8	8337	14408	17640	5.800	18055	13264	13744	18403	18354
5.9	8355	14417	17656	5.900	18076	13278	13760	18427	18368
6	8370	14427	17670	6.000	18094	13290	13775	18449	18379
7	8466	14513	17757	7.000	18215	13377	13868	18597	18445
8	8519	14571	17804	8.000	18280	13429	13919	18677	18482
9	8544	14599	17825	9.000	18311	13454	13942	18715	18498
10	8553	14609	17833	10.000	18323	13464	13951	18732	18502
R(Å)	$1_u(III)$	$0_u^-(II)$	$1_u(IV)$	$0_u^-(III)$	$2_u(II)$	$1_u(V)$	$3_u(I)$	$1_u(VI)$	$0_u^-(IV)$
1.701	219340	222012	226707	228410	229195	229196	230984	232567	237562
1.801	153763	156749	161187	162650	164570	164570	165612	166794	172187
1.850	130255	133234	137616	138957	140840	140840	142696	143106	148651
1.900	110521	113568	117848	119085	120881	120881	123225	123638	129066
1.950	94350	97410	101557	102752	104464	104464	106889	108048	113079
2.000	81036	84144	88232	89319	90902	90902	93457	95193	100209
2.050	70089	73236	77272	78248	79689	79689	82387	84569	89841
2.100	61084	64260	68249	69110	70344	70345	73255	75745	77670
2.150	53674	56880	60819	61560	62498	62498	65716	67855	68403
2.200	47603	51008	54697	55339	55679	55680	59511	59728	62491
2.250	42618	45951	49409	49650	50121	50128	53389	54355	56871
2.301	38420	25384	43580	44899	45447	45624	48508	49997	50707
2.350	35093	38073	38610	39209	41830	42094	44815	45878	45921
2.400	32293	33619	34218	35884	38248	39214	41345	41819	42067
2.450	29974	29655	30430	33494	34872	36760	37504	39248	39387
2.501	27068	26343	28094	31553	31761	34264	34700	37223	37564
2.550	24216	23613	26544	29977	29035	31605	32918	35725	36178
2.600	21815	21312	25196	28591	26715	29425	31272	34489	34998
2.650	19829	19387	23998	27347	24761	27707	29722	32826	33540
2.701	18125	17739	22907	26205	23061	26458	28217	31172	32156
2.750	16802	16406	21927	25270	21731	25666	26957	29954	30957
2.790	15955	15399	21007	24528	20883	24922	26155	28338	31777
2.850	14944	14112	19903	23643	19827	24288	25047	27041	30548
2.901	14469	13284	19173	23054	19103	23893	24278	26180	29410

2.950	14500	12989	18856	22691	18223	23594	23507	25519	28471
3.000	14742	13160	18435	22275	17709	23322	22985	25018	27657
3.050	15034	13540	18128	21941	17248	23065	22572	24662	27420
3.102	15342	13999	17944	21662	16863	22810	22239	24384	27406
3.150	15600	14432	17904	21451	16639	22619	22004	24186	27353
3.200	15831	14882	17982	21276	16503	22470	21821	24027	27254
3.250	16022	15325	18162	21141	16442	22364	21691	23902	27096
3.301	16183	15752	18418	21037	16440	22296	21608	23778	26875
3.350	16337	16162	18719	20960	16487	22261	21559	23713	26622
3.400	16488	16517	19043	20901	16576	22252	21540	23637	26354
3.451	16647	16907	19380	20858	16705	22266	21547	23567	26086
3.500	16809	17223	19695	20831	16859	22294	21573	23504	25841
3.550	16981	17513	20002	20817	17044	22331	21614	23443	25607
3.600	17159	17769	20288	20818	17252	22371	21665	23386	25393
3.650	17343	17993	20549	20833	17475	22409	21710	23338	25206
3.701	17530	18188	20788	20865	17726	22439	21771	23298	25084
3.750	17708	18346	20992	20912	17980	22459	21833	23271	25166
3.800	17886	18481	21176	20974	18251	22472	21899	23254	25322
3.850	18058	18592	21339	21050	18527	22480	21966	23248	25491
3.910	18254	18702	21513	21169	18849	22489	22041	23265	25699
3.940	18345	18746	21584	21225	19017	22486	22085	23264	25808
4.000	18523	18827	21727	21340	19347	22507	22168	23283	26005
4.100	18782	18931	21931	21561	19867	22546	22300	23323	26326
4.202	19005	19017	22113	21791	20351	22611	22427	23378	26626
4.301	19186	19090	22273	22008	20770	22688	22540	23441	26887
4.400	19331	19154	22418	22209	21146	22780	22648	23511	27093
4.501	19464	19219	22554	22403	21472	22865	22734	23585	27227
4.600	19577	19283	22677	22578	21751	22952	22812	23660	27318
4.700	19673	19342	22786	22735	21993	23036	22881	23733	27403
4.800	19755	19396	22880	22874	22202	23117	22944	23801	27485
4.900	19823	19445	22968	22994	22381	23194	23000	23863	27561
5.010	19887	19494	23046	23105	22549	23272	23053	23923	27637
5.100	19931	19529	23091	23180	22665	23330	23098	23967	27693
5.201	19974	19565	23128	23247	22777	23388	23146	24011	27749
5.300	20008	19595	23165	23294	22869	23435	23188	24050	27797
5.400	20037	19623	23194	23325	22949	23478	23220	24083	27840
5.500	20062	19647	23219	23344	23015	23514	23247	24112	27877
5.600	20083	19668	23241	23355	23072	23545	23269	24137	27909
5.700	20101	19686	23259	23363	23120	23566	23288	24158	27937
5.800	20116	19703	23276	23368	23161	23585	23303	24177	27961
5.900	20130	19718	23291	23372	23196	23604	23317	24193	27983
6.000	20141	19732	23304	23375	23226	23623	23329	24208	28001
7.000	20220	19831	23397	23420	23369	23734	23406	24304	28118

8.000	20267	19889	23453	23468	23421	23785	23464	24357	28176
9.000	20289	19917	23479	23497	23445	23807	23490	24382	28201
10.000	20297	19928	23489	23508	23454	23815	23498	24391	28210

Table S2b. The potential energy curves of the Ω states for $\text{Pb}_2(\text{cm}^{-1})$.

R(Å)	$1_u(VII)$	$F0_u^+(II)$	$0_u^-(V)$	$2_u(III)$	$0_u^+(III)$	$1_u(VIII)$	$0_u^-(VI)$	$2_u(IV)$	$1_u(IX)$	$3_u(II)$
1.701	237563	252349	252351	254321	256457	256458	256802	256885	259244	262592
1.801	172187	183787	183788	188378	188379	188447	190112	190618	193753	194194
1.850	148652	158402	158402	163134	163136	163524	163926	167864	168874	169340
1.900	129066	140644	140647	140875	142015	142028	142573	146232	146795	147032
1.950	113079	119909	119913	124322	124455	124456	125303	125335	128228	128867
2.000	100209	103503	103505	109475	109475	109592	109877	110049	110772	114802
2.050	89841	90401	90401	95877	95877	96530	96787	97715	97740	101953
2.100	80203	81530	81530	84441	84442	84812	87635	87644	87721	89116
2.150	72962	72991	73810	74991	75347	75347	79009	79365	79402	79936
2.200	64268	64290	65630	69746	70134	70134	70339	72110	73112	73223
2.250	56973	56973	58246	63011	63011	63878	64916	66071	67143	67712
2.301	51092	51092	53380	56636	56636	57463	58571	61716	62173	62287
2.350	45921	46478	49635	51435	51435	52173	53322	57296	57907	58355
2.400	42076	43394	45515	46969	46969	47634	48939	52987	53604	54434
2.450	39387	40630	41809	43371	43372	43944	45674	49274	49602	51186
2.501	37565	38008	38608	40274	40276	41118	43328	46104	46109	47653
2.550	36179	35519	35930	37809	37809	39045	41539	43047	43443	44397
2.600	35006	33165	33685	35953	35954	37461	39997	40367	41195	41772
2.650	33549	31043	31859	34601	34601	36180	38097	38564	39323	39726
2.701	32762	29493	30410	33511	33512	34989	36146	37263	37737	38065
2.750	31736	28321	29392	32863	32864	33346	34545	36112	36358	36694
2.790	31791	26550	28765	32290	32501	32501	33511	34754	35390	35712
2.850	31278	25200	28113	31307	31823	32033	32545	33453	34124	34263
2.901	30282	24297	27763	30962	30866	31751	32117	32578	33088	33290
2.950	29363	23567	27537	30615	30050	31520	31667	31988	32190	32433
3.000	28538	22991	27400	30235	29297	31059	31363	31486	31508	31690
3.050	27810	22551	26909	29783	28606	30508	30717	30961	31082	31215
3.102	27145	22227	26296	29263	27952	30021	30007	30547	30555	31075
3.150	26607	22045	25822	28782	27423	29656	29476	30254	30119	30948
3.200	26122	21965	25417	28314	26940	29347	29059	29990	29712	30809
3.250	25707	21984	25095	27887	26517	29092	28781	29740	29355	30658
3.301	25355	22089	24853	27500	26148	28851	28615	29490	29049	30496
3.350	25070	22262	24683	27157	25832	28669	28457	29238	28786	30318
3.400	24841	22489	24580	26847	25567	28452	28249	28983	28596	30134
3.451	24665	22749	24536	26564	25352	28238	28037	28712	28449	29944
3.500	24550	23002	24543	26319	25206	28053	27852	28494	28331	29767
3.550	24485	23230	24593	26094	25135	27886	27686	28282	28228	29593

3.600	24470	23393	24678	25892	25165	27743	27543	28093	28141	29429
3.650	24510	23481	24806	25712	25303	27623	27439	27940	28068	29258
3.701	24580	23495	24886	25545	25593	27521	27338	27793	28008	29107
3.750	24677	23467	24793	25411	25798	27441	27258	27670	27962	28972
3.800	24803	23419	24648	25267	26077	27375	27192	27562	27925	28843
3.850	24950	23364	24508	25147	26355	27324	27140	27469	27897	28723
3.910	25151	23300	24366	25014	26665	27298	27113	27376	27876	28586
3.940	25246	23268	24276	24953	26806	27259	27073	27337	27861	28525
4.000	25460	23219	24151	24854	27057	27243	27054	27275	27849	28411
4.100	25817	23157	23967	24709	27380	27235	27045	27207	27839	28250
4.202	26164	23125	23819	24598	27600	27256	27069	27178	27845	28127
4.301	26473	23120	23710	24523	27738	27297	27120	27180	27864	28045
4.400	26736	23133	23629	24478	27826	27351	27203	27203	27891	27998
4.501	26983	23160	23569	24446	27877	27416	27362	27239	27928	27970
4.600	27192	23197	23528	24431	27910	27482	27544	27284	27991	27954
4.700	27366	23238	23500	24426	27935	27548	27708	27333	28038	27958
4.800	27507	23280	23483	24429	27959	27611	27850	27382	28092	27968
4.900	27617	23322	23473	24437	27980	27670	27972	27429	28147	27984
5.010	27708	23369	23471	24450	27998	27728	28085	27476	28215	28003
5.100	27763	23407	23474	24462	28010	27772	28164	27510	28270	28019
5.201	27813	23445	23486	24476	28022	27816	28240	27545	28325	28038
5.300	27856	23467	23505	24490	28049	27856	28302	27582	28344	28055
5.400	27890	23495	23531	24503	28061	27891	28356	27610	28383	28071
5.500	27919	23521	23562	24517	28072	27922	28401	27635	28417	28086
5.600	27943	23546	23593	24529	28081	27948	28439	27657	28447	28099
5.700	27964	23572	23623	24541	28089	27971	28472	27677	28474	28112
5.800	27981	23595	23650	24553	28096	27991	28499	27694	28497	28123
5.900	27995	23615	23674	24564	28103	28009	28523	27709	28517	28134
6.000	28008	23632	23696	24574	28109	28024	28544	27723	28535	28144
7.000	28092	23738	23832	24669	28165	28123	28668	27818	28649	28228
8.000	28141	23806	23897	24732	28209	28176	28729	27874	28708	28285
9.000	28163	23837	23927	24761	28233	28201	28758	27900	28735	28312
10.00	28171	23849	23939	24772	28243	28209	28769	27910	28745	28322

Table S3. The main configurations at R_e for the Λ -S states of Pb_2 .

Stat	Main configurations at R_e (%)
e	
$X^3\Sigma_g^-$	$2\sigma_g^2\pi_u^2(89.54); 2\sigma_g^2\pi_g^2(3.17)$
$A^3\Pi_u$	$2\sigma_g^1\pi_u^3(84.28); 2\sigma_g^1\pi_u^1\pi_g^1(6.82)$

$$\begin{aligned}
a^1\Delta_g & 2\sigma_g^2\pi_u^2(86.05); 2\sigma_g^2\pi_g^2(7.33) \\
b^1\Sigma_g^+ & 2\sigma_g^2\pi_u^2(72.78); \pi_u^4(10.83); 2\sigma_g^2\pi_g^2(8.50) \\
c^1\Pi_u & 2\sigma_g^1\pi_u^3(82.57); 2\sigma_g^1\pi_u^1\pi_g^2(7.37) \\
1^5\Pi_g & 2\sigma_g^1\pi_u^2\pi_g^1(95.34); \\
d^1\Sigma_g^+ & \pi_u^4(62.14); 2\sigma_g^2\pi_u^2(10.43); \pi_u^2\pi_g^2(19.4); \pi_g^4(1.85) \\
1^1\Sigma_u^- & 2\sigma_g^2\pi_u^1\pi_g^1(92.58); \\
1^3\Delta_u & 2\sigma_g^2\pi_u^1\pi_g^1(92.34); \\
1^3\Sigma_u^+ & 2\sigma_g^2\pi_u^1\pi_g^1(77.20); \pi_u^3\pi_g^1(15.93) \\
D^3\Pi_g & 2\sigma_g^1\pi_u^2\pi_g^1(91.50); 2\sigma_g^1\pi_g^3(1.70) \\
1^1\Pi_g & 2\sigma_g^1\pi_u^2\pi_g^1(81.41); 2\sigma_u^1\pi_g^3(5.29) \\
2^3\Sigma_u^+ & \pi_u^3\pi_g^1(67.13); 2\sigma_g^1\pi_u^2\pi_g^1(16.58) \\
F^3\Sigma_u^- & 2\sigma_g^2\pi_u^1\pi_g^1(64.66); \pi_u^3\pi_g^1(11.04); 2\sigma_g^1\pi_u^12\sigma_u^1(16.18)
\end{aligned}$$

Table S4a. The Λ -S compositions for $X0_g^+$ state.

R(Å)	$b^1\Sigma_g^+$	$X^3\Sigma_g^-$	$D^3\Pi_g$	$4^3\Pi_g$	$1^5\Delta_g$	$1^5\Pi_g$
2.85	0.2255	0.4703	0.0542	0.0178	0.0034	0.1274
2.901	0.2315	0.4589	0.0568	0.0234	0.0044	0.1282
2.95	0.235	0.4473	0.0602	0.0274	0.0054	0.1302
3	0.2372	0.4353	0.064	0.0314	0.0066	0.133
3.05	0.2382	0.4228	0.0682	0.0352	0.008	0.1358
3.102	0.2383	0.4095	0.0732	0.0392	0.0094	0.139
3.15	0.2377	0.3969	0.0782	0.0426	0.011	0.1424
3.2	0.2364	0.3835	0.0838	0.0464	0.0132	0.146
3.25	0.2345	0.3698	0.0896	0.0502	0.0152	0.1496
3.3	0.2319	0.3559	0.096	0.054	0.0178	0.1534
3.35	0.2286	0.3413	0.1026	0.0576	0.0204	0.1572
3.4	0.2246	0.3265	0.1096	0.0614	0.0236	0.1612
3.451	0.2211	0.3133	0.116	0.0654	0.027	0.1646

3.5	0.2167	0.2996	0.1224	0.0692	0.0308	0.1682
3.55	0.2118	0.2857	0.1286	0.073	0.0348	0.1716
3.6	0.2067	0.2721	0.1348	0.0764	0.039	0.1748
3.65	0.2013	0.2589	0.1404	0.08	0.0438	0.178
3.701	0.1956	0.2458	0.1458	0.0834	0.0486	0.1808
3.75	0.1901	0.2339	0.1506	0.0868	0.0538	0.183
3.8	0.1844	0.2222	0.155	0.0898	0.0592	0.1852
3.85	0.1788	0.2112	0.159	0.0928	0.0647	0.187
3.91	0.1722	0.1989	0.1632	0.096	0.0713	0.1888
3.94	0.1695	0.1933	0.1654	0.0978	0.0749	0.1882
4	0.1629	0.1822	0.1686	0.1004	0.0815	0.1906
4.1	0.1534	0.1662	0.173	0.1044	0.0925	0.1916
4.202	0.145	0.1525	0.1762	0.1078	0.1031	0.1918
4.301	0.1379	0.1413	0.1784	0.1104	0.1127	0.1916
4.4	0.132	0.132	0.1798	0.1126	0.1215	0.1908
4.5	0.1271	0.1242	0.1806	0.1142	0.1293	0.1898
4.6	0.1231	0.1177	0.181	0.1156	0.1361	0.1888
4.7	0.12	0.1125	0.181	0.1166	0.1419	0.1878
4.8	0.1178	0.1083	0.1808	0.1174	0.1469	0.1866

Table S4b. The Λ -S compositions for $CO_u^+(I)$ state

R(Å)	$A^3\Pi_u$	$2^3\Pi_u$	$5^3\Pi_u$	$F^3\Sigma_u^-$	$1^5\Pi_u$
2.85	0.9456	0.0044	0.002	0.0031	0.008
2.901	0.9354	0.006	0.0024	0.0067	0.0108
2.95	0.9224	0.0082	0.0036	0.0116	0.0144
3	0.9052	0.0112	0.0052	0.0181	0.0194
3.05	0.8824	0.0154	0.0072	0.0268	0.0262
3.102	0.8522	0.021	0.0102	0.0383	0.0352
3.15	0.8174	0.0278	0.0138	0.0511	0.0458
3.2	0.7746	0.036	0.019	0.0663	0.0594
3.25	0.7258	0.0458	0.0252	0.0827	0.075
3.301	0.6736	0.0562	0.0324	0.0989	0.0922
3.35	0.6216	0.067	0.0406	0.1145	0.1102
3.4	0.5718	0.0774	0.049	0.1275	0.1278
3.451	0.5264	0.0868	0.0578	0.1381	0.1446
3.5	0.489	0.0948	0.066	0.1457	0.1592
3.55	0.4576	0.1014	0.0738	0.1509	0.172
3.6	0.4324	0.1062	0.0816	0.1539	0.1832
3.65	0.4128	0.1094	0.0884	0.1551	0.193
3.701	0.3978	0.1106	0.0948	0.1549	0.201
3.75	0.3876	0.1102	0.1004	0.1536	0.2076

3.8	0.3806	0.1082	0.1054	0.1515	0.2132
3.85	0.3768	0.1048	0.1098	0.1489	0.218
3.91	0.3752	0.0996	0.1144	0.1452	0.2224
3.94	0.3752	0.096	0.1162	0.1432	0.2246
4	0.3772	0.0888	0.1198	0.1391	0.2276
4.1	0.3828	0.0754	0.1238	0.1319	0.231
4.202	0.3892	0.0616	0.1258	0.124	0.232
4.301	0.3936	0.0494	0.1256	0.1159	0.2308
4.4	0.395	0.0392	0.1234	0.1075	0.2274
4.501	0.3932	0.0312	0.1198	0.0991	0.2226
4.6	0.3888	0.0254	0.1154	0.0913	0.2174
4.7	0.3834	0.0212	0.1112	0.0845	0.2126
4.8	0.3778	0.0182	0.1074	0.0788	0.2086

Table S4c. The Λ -S compositions for $F0_u^+(II)$ state

R(\AA)	$A^3\Pi_u$	$2^3\Pi_u$	$4^3\Pi_u$	$5^3\Pi_u$	$F^3\Sigma_u^-$	$2^3\Sigma_u^-$	$1^5\Pi_u$
2.85	0.0192	0.1114	0	6.92E-02	0.5522	0.0068	0.2398
2.901	0.0288	0.1148	0	0.0738	0.5299	0.0039	0.2482
2.95	0.041	0.117	0	0.0782	0.5059	0.0021	0.2552
3	0.0574	0.1172	0	0.0822	0.481	9.00E-04	0.26
3.05	0.0788	0.1154	0	0.0858	0.4564	2.00E-04	0.2614
3.102	0.1076	0.111	0	0.0888	0.4293	0	0.26
3.15	0.1406	0.1058	0	0.0912	0.4	3.00E-04	0.2586
3.2	0.1812	0.0978	0	0.0928	0.3659	0.001	0.2566
3.25	0.227	0.0876	0	0.094	0.33	0.0024	0.2544
3.301	0.2744	0.0744	0	0.0942	0.2939	0.0047	0.253
3.35	0.322	0.0592	0	0.093	0.2573	0.0071	0.2544
3.4	0.3636	0.0416	0	0.0912	0.2221	0.0103	0.262
3.451	0.3956	0.0228	0	0.0882	0.1863	0.0142	0.2802
3.5	0.41	0.0066	0	0.083	0.1504	0.0187	0.3122
3.55	0.3994	2.00E-04	0	0.0736	0.111	0.0245	0.362
3.6	0.358	0.0154	0	0.0598	0.0716	0.0312	0.4206
3.65	0.2998	0.0524	0.0524	0.0446	0.0405	0.0378	0.4678
3.701	0.2438	0.0974	0.062	0.0316	0.0207	0.0437	0.4938
3.75	0.2056	0.1338	0.0672	0.0232	0.0108	0.0485	0.5022
3.8	0.1806	0.1606	0.0704	0.0176	0.0057	0.0527	0.5026
3.85	0.1656	0.1784	0.072	0.014	0.0031	0.0564	0.4994
3.91	0.1566	0.191	0.0728	0.011	0.0015	0.0605	0.4944
3.94	0.1544	0.1948	0.073	0.0098	0.001	0.0624	0.492
4	0.1534	0.1982	0.073	0.0084	5.00E-04	0.066	0.4868
4.1	0.1586	0.1964	0.0728	0.0062	1.00E-04	0.0716	0.479

4.202	0.168	0.189	0.0724	0.0048	0	0.0767	0.4722
4.301	0.1788	0.1796	0.0718	0.0038	0	0.0812	0.4662
4.4	0.1894	0.1694	0.0712	0.003	1.00E-04	0.0853	0.461
4.501	0.1992	0.1596	0.0706	0.0022	3.00E-04	0.089	0.4564
4.6	0.2074	0.1512	0.07	0.0018	4.00E-04	0.0923	0.452
4.7	0.2142	0.1436	0.0692	0.001	6.00E-04	0.0951	0.4484

Table S4d. The Λ -S compositions for 0_u^+ (*III*) state.

R(Å)	$A^3\Pi_u$	$2^3\Pi_u$	$3^3\Pi_u$	$5^3\Pi_u$	$2^3\Sigma_u^-$	$F^3\Sigma_u^-$	$3^3\Sigma_u^-$	$1^5\Pi_u$
2.85	0.0058	0.008	0.0654	0.0178	0.0365	0.2821	0.0162	0.5618
2.95	0.0022	0.0658	0.0908	0.0092	0.0117	0.2249	0.0249	0.5614
3	0.0014	0.1072	0.0968	0.0054	0.0068	0.1973	0.029	0.5512
3.05	8.00E-04	0.1456	0.0982	0.0032	0.0039	0.1744	0.0319	0.5374
3.102	4.00E-04	0.1798	0.0966	0.0018	0.002	0.1563	0.0346	0.5226
3.15	0	0.2142	0.0952	8.00E-04	9.00E-04	0.14	0.0374	0.5048
3.2	0	0.2516	0.0932	0	3.00E-04	0.1245	0.0404	0.4828
3.25	0	0.2876	0.0908	0	0	0.1119	0.043	0.4592
3.301	8.00E-04	0.3214	0.0878	6.00E-04	1.00E-04	0.1029	0.0453	0.434
3.35	0.0022	0.352	0.0844	0.002	0.002	0.098	0.0469	0.4068
3.4	0.0062	0.38	0.0804	0.0044	0.002	0.0978	0.0481	0.3748
3.451	0.0148	0.406	0.0748	0.0082	0.002	0.1036	0.049	0.334
3.5	0.0332	0.4258	0.0674	0.015	0.0019	0.1166	0.0498	0.2822
3.55	0.0702	4.32E-01	0.0566	0.0266	0.0017	0.1384	0.0507	0.2144
3.6	0.1312	0.4142	0.0424	0.044	0.0015	0.1657	0.0516	0.1406
3.65	0.2012	0.368	0.0016	0.064	0.0018	0.1894	0.0519	0.0832
3.75	0.2984	0.2812	0.0012	0.098	1.00E-04	0.2166	0.056	0.0308
3.8	0.322	0.2414	4.00E-04	0.1156	0	0.232	0.0586	0.0198
3.85	0.3272	0.2072	0	0.1322	0	0.2462	0.0614	0.0166
3.91	0.3182	0.1718	0	0.1536	0	0.2645	0.0646	0.0172
3.94	0.309	0.1558	4.00E-04	0.165	0	0.2739	0.066	0.0188
4	0.2846	0.1266	4.00E-04	1.89E-01	0	0.2914	0.0681	0.0236
4.1	0.2372	0.0878	0	2.30E-01	0	0.3119	0.0694	0.0354
4.202	0.1918	0.058	4.00E-04	0.2684	6.00E-04	0.3183	0.0678	0.0488
4.301	0.1564	0.0386	0.0012	0.297	0.0041	0.3072	0.0634	0.0606
4.4	0.1272	0.0242	0.004	3.04E-01	0.0198	0.2713	0.0544	0.071
4.501	0.104	0.0134	0.008	2.76E-01	0.0591	0.2032	0.0394	0.0798
4.6	0.0926	0.0084	0.0104	2.39E-01	0.1005	0.1415	0.0265	0.0856
4.7	0.0896	0.0066	0.01	2.20E-01	0.1254	0.1083	0.0197	0.0882
4.8	0.0906	0.0062	0.0088	2.13E-01	0.1383	0.0922	0.0164	0.0894

2.85	0.0058	0.008	0.0654	0.0178	0.0365	0.2821	0.0162	0.5618
------	--------	-------	--------	--------	--------	--------	--------	--------

Table S5. The influence of non-adiabatic effect on energy for $F_0^+(II)$ and $0_u^+(III)$ states.

Vibrational level ν	Adiabatic energy (cm ⁻¹)	Non-adiabatic energy (cm ⁻¹)	Differentials(cm ⁻¹)
$F_0^+(II)$			
0	22016	22270	-254
1	22126	22377	-250
2	22236	22482	-246
$0_u^+(III)$			
0	25191	25118	73
1	25304	25226	78
2	25418	25334	84

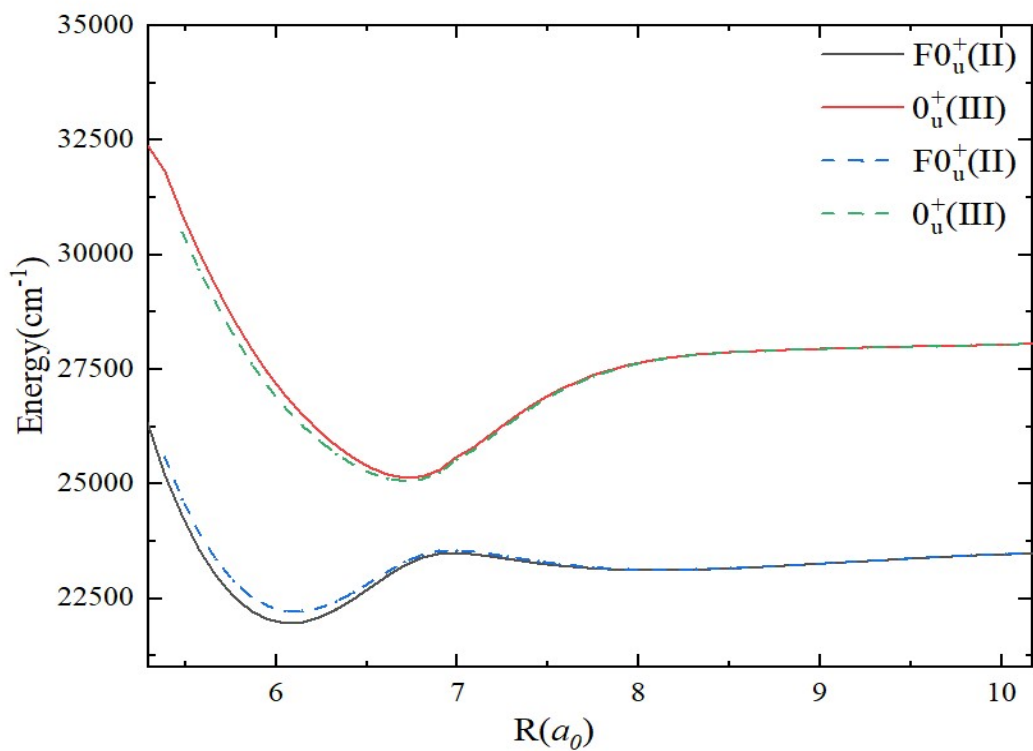


Figure S1, Potential energy curve in the adiabatic (solid line) and non-adiabatic (dotted line) representation.

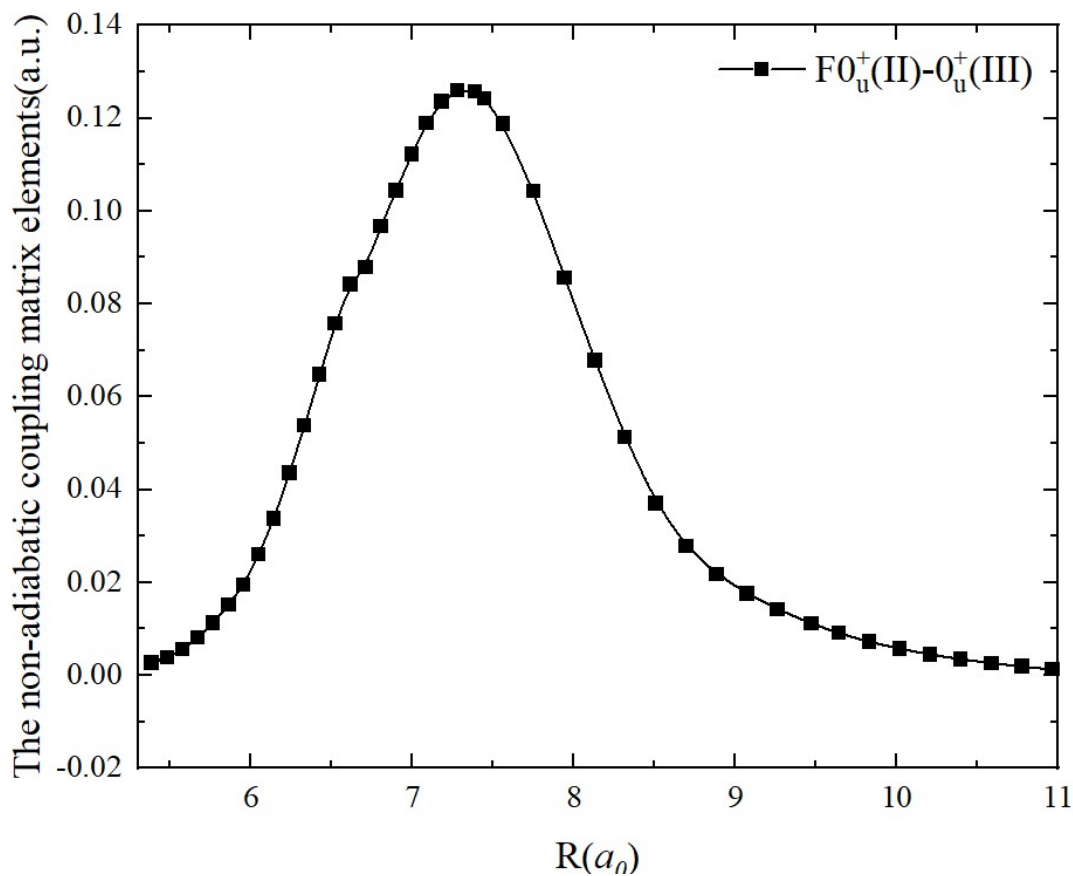


Figure S2, The non-adiabatic coupling matrix elements of between $\text{F}^{0+}_u(\text{II})$ and $\text{O}^{0+}_u(\text{III})$.

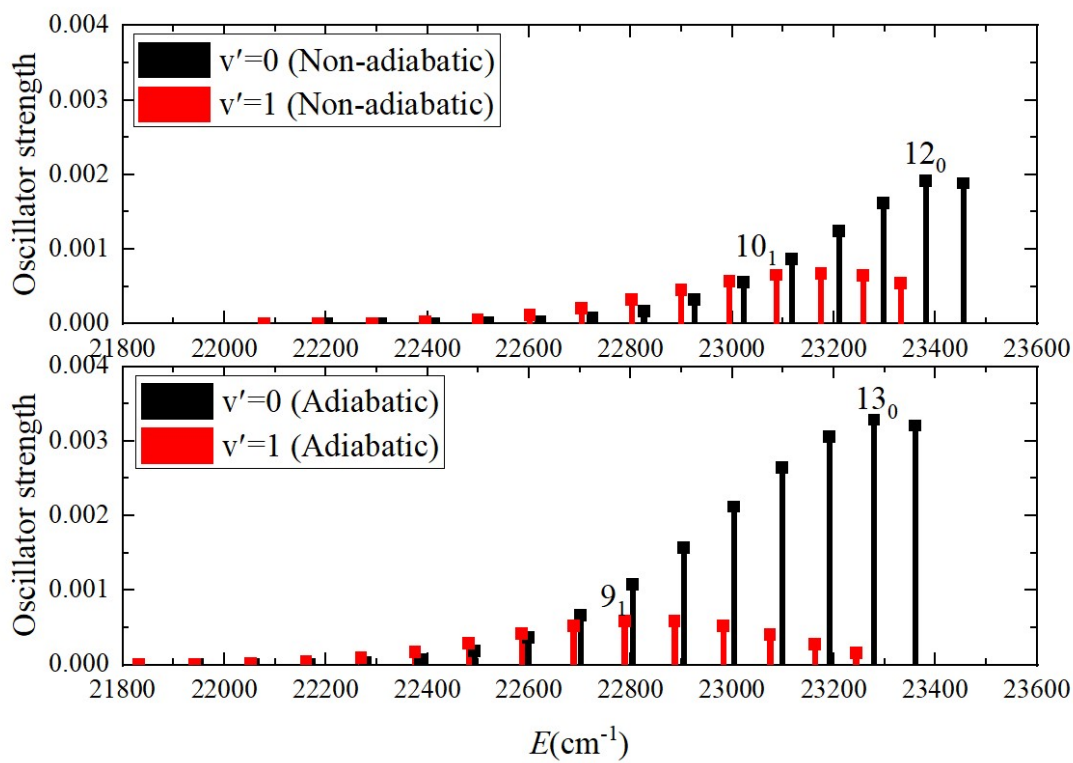


Figure S3, The oscillator strength of the $X \rightarrow \text{F}^{0+}_u(\text{II})$ transition with the non-adiabatic and adiabatic.

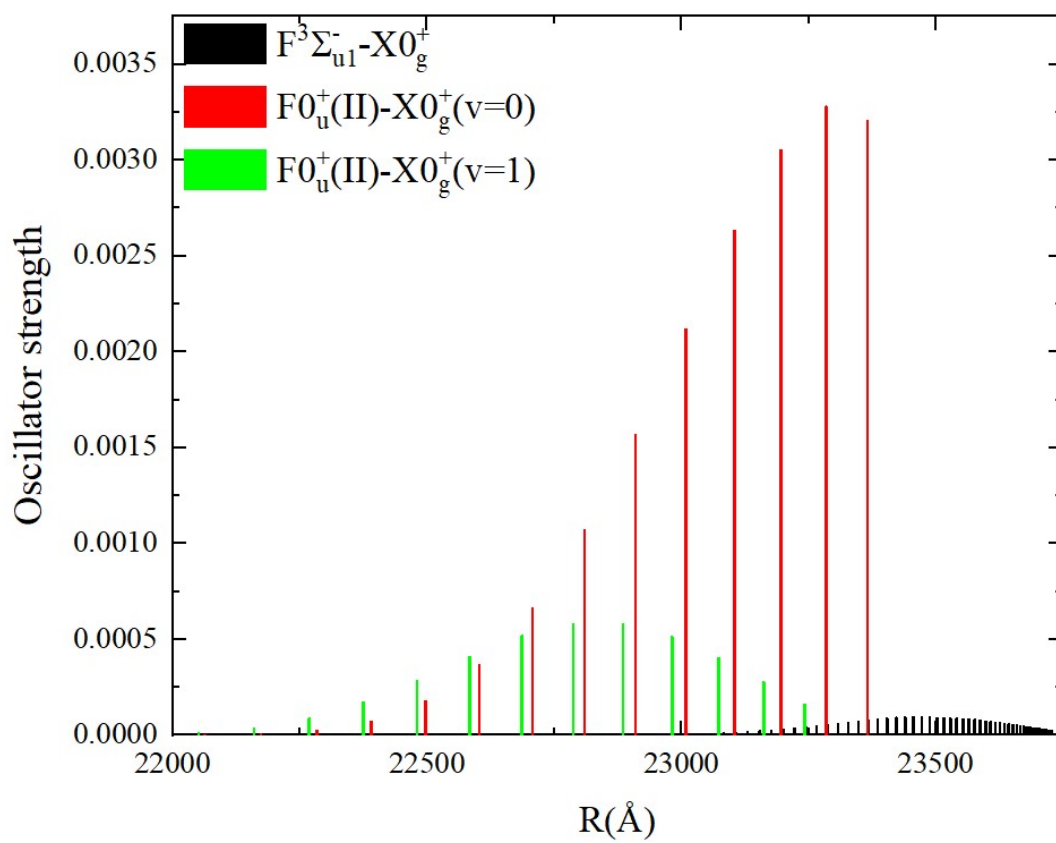


Figure S4, The oscillator strength of the $X \rightarrow F^0_u^+(II), F^3\Sigma_{u1}^-$ transitions under the adiabatic.

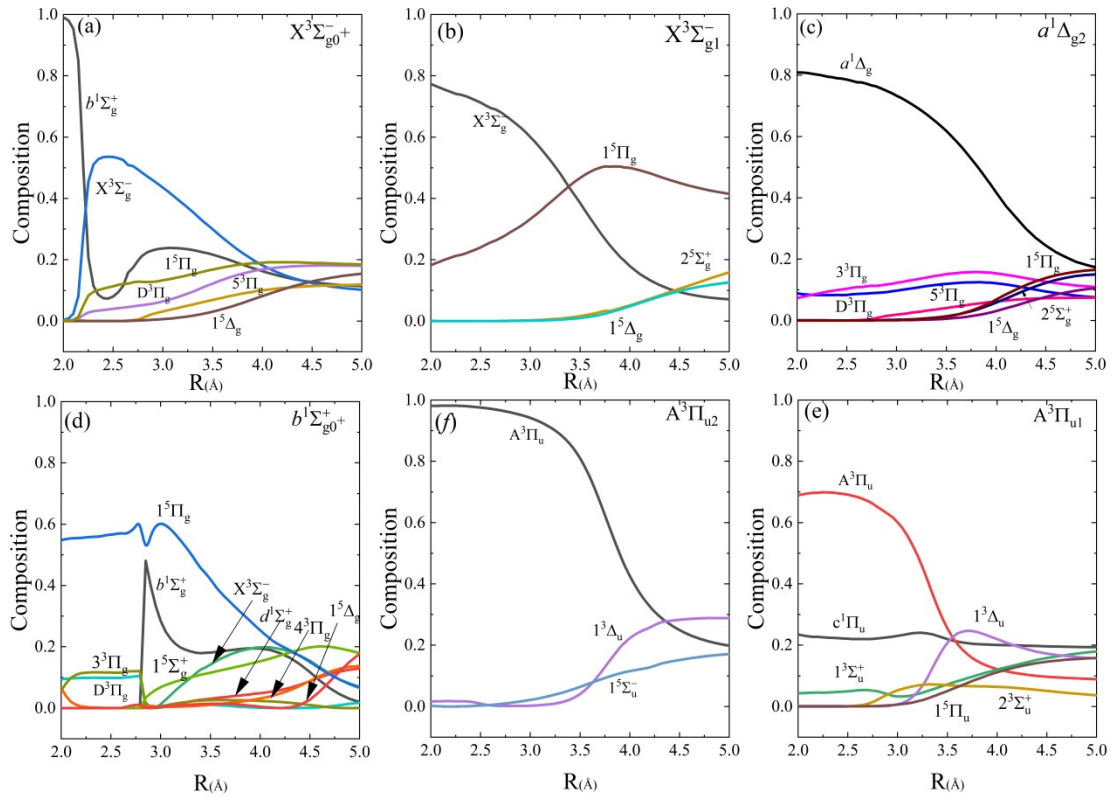


Figure S5. The Λ -S compositions for Ω states.

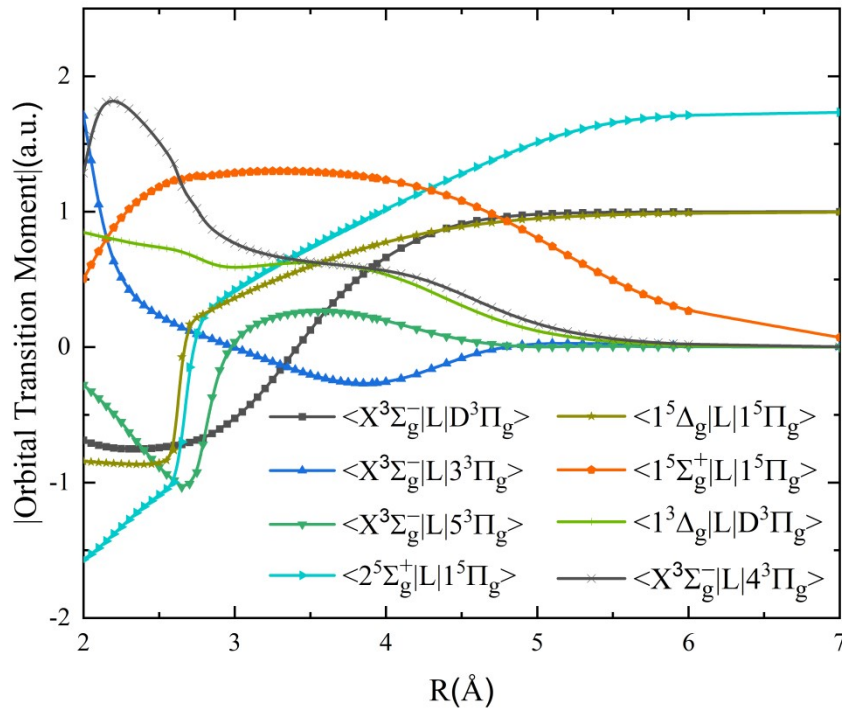


Fig.S6. The orbital contributions to magnetic transition moments of Λ -S states for Pb_2 .

Table S6. The spectroscopic constants for the low-lying gerade states of Pb₂.

State		T _e (cm ⁻¹)	R _e (Å)	ω _e (cm ⁻¹)	ω _e x _e (cm ⁻¹)	B _e (cm ⁻¹)	D _e (cm ⁻¹)
$X^3\Sigma_g^-$	TW	4778.9	2.8992	132.2808	0.5579	0.0194	9585.9
	Cal. ³⁹	4227	3.049	107			
	Cal. ⁴²	4150	2.94	124			
	Exp. ³⁰	5304.9	2.900	120.57	0.254		
$a^1\Delta_g$	TW	7800.1	2.9328	127.8939	0.3915	0.0189	10032.8
	Cal. ³⁹	8150	3.068	111			
	Cal. ⁴²	10130	3.03	105			
$b^1\Sigma_{g0}^+$	TW	12596.5	3.0556	83.4296	0.4448	0.0174	5291.1
	Cal. ³⁹	11886	3.275	72			
	Cal. ⁴²	13640	3.18	74			

Table S7. From the theoretical point of view, the magnetic dipole moment transitions ($b^1\Sigma_{g0}^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ and $a^1\Delta_g \rightarrow$

$X^3\Sigma_g^-$) band can be observed experimentally.

$b^1\Sigma_{g0}^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-$				$a^1\Delta_g \rightarrow X^3\Sigma_g^-$			
v'	v''	ΔE/cm ⁻¹	A/s ⁻¹	v'	v''	ΔE/cm ⁻¹	A/s ⁻¹
0	0	7673.9	1.60	0	0	3147.0	2.81E-03
0	1	7439.6	4.44	0	1	3016.7	2.19E-05
0	2	7214.7	4.25	0	2	2886.2	1.00E-05
0	3	6996.9	2.16	0	3	2756.4	1.34E-06
0	4	6785.3	7.03E-01	0	4	2627.3	2.81E-08
0	5	6579.1	1.61E-01	0	5	2499.2	3.01E-09
0	6	6377.7	2.76E-02	0	6	2372.6	8.65E-11
0	7	6180.8	3.65E-03	0	7	2248.0	3.85E-10
0	8	5987.9	3.62E-04	0	8	2125.7	6.13E-11
0	9	5799.0	3.63E-05	0	9	2004.9	3.04E-11
0	10	5613.7	1.26 E-06	0	10	1885.2	1.58E-10
				0	11	1766.1	5.96E-11
				0	12	1647.5	4.02E-11