

Allo - N

VII 250.5

1954

re(MoN, WN)

Schonberg N.

Acta chem.scand., 1954, 8, N2, 204-7.

Contributions to the knowledge of the molybdenum-nitrogen and the tungsten-nitrogen systems.

RX., 1955, N10, 18193 M1

cert q. k.

VII 1517

1961

Мо.Н (ze)

Трошук Н.В., Тинскер З.Т.

Кристаллография, 1961, 6, с.1,
43-48.

РМХ, 1961,

22 Б 159

Мел

1965

MoO $\rightarrow$ MoN

C. A. Conway

Nitride and oxide bands of molybdenum. John C. Howard and John G. Conway (Univ. of California, Berkeley). *J. Chem. Phys.* 43(9), 3055-7(1965)(Eng). Investigation of the orange system bands (5990-6300 Å.) produced by a Mo arc in air shows that they are a nitride system, and not an oxide as previously reported. Isotope shifts by using ^{14}N and ^{15}N are given. Evidence is presented that other bands, less conspicuous and hitherto unidentified, occurring in the red are an oxide of Mo, together with confirmation that the near-ir bands formerly attributed to an oxide are such.

RCJO

C.A. 1965. 63.13
17301

1965

MoN₂
MoO₃

✓ 9 Д169. Спектры нитрида и оксида молибдена.
Howard John C., Conway John G. Nitride and
oxide bands of molybdenum. «J. Chem. Phys.», 1965, 43,
№ 9, 3055—3057 (англ.)

+ 124

43. 1966. 92

✓

VI 3943 $(\text{NH}_4)_2 \text{MoO}_2 \text{S}_2$ } 1966
 $(\text{NH}_4)_2 \text{WO}_2 \text{S}_2$ } Vi, u. n.

Müller A., Gattow G.,
Z. anorgan. und allgem. Chem.,
1966, 348, N1-2, 71-76

PX 1967
115172

ЕСТЬ Ф. Н.

MoN

Gingerich K.A.

1968

y. Chem. Phys.,

49, N1, 19

Wegman.

Do

(Cell. Th N) I

(NH₄)₂ Mo -

O S
2 2

1966

III-3943-VII
Bp-3943-VII

11 Б178. Халкогенометалаты. III. Колебательные спектры ионов $\text{MoO}_2\text{S}_2^{2-}$ и $\text{WO}_2\text{S}_2^{2-}$. Müller A., Gattow G. Über Chalkogenometallate. III. Die Schwingungsspektren der $\text{MoO}_2\text{S}_2^{2-}$ — und $\text{WO}_2\text{S}_2^{2-}$ — Ionen. «Z. anorgan. und allgem. Chem.», 1966, 348, № 1—2, 71—76 (нем.; рез. англ.)

Получены ИК-спектры $(\text{NH}_4)_2\text{MoO}_2\text{S}_2$ (I) и $(\text{NH}_4)_2\text{WO}_2\text{S}_2$ (II) (в табл. КВГ) и предложено отнесение полос (для I и II соотв.): $\nu\delta\text{O-Mo}$ 305 и 303 см^{-1} ; ν (сим.) Mo 836 и 858 см^{-1} ; ν (асим.) Mo 800 и 805 см^{-1} ; ν (сим.) MS и 480 см^{-1} ; ν (асим.) MS 488 и 465 см^{-1} . При переходе $\text{MO}_4^{2-} \rightarrow \text{MO}_2\text{S}_2^{2-} \rightarrow \text{MS}_4^{2-}$ νMO смещается в длинноволновую область, в то время как для $\nu\text{M-S}$ наблюдается обратная закономерность. Сопоставление величин силовых констант показывает, что при вступлении двух атомов в ион MO_4^{2-} прочность связи M—O уменьшается. Сообщ. II. см. РЖХим, 1966, 9Б370.

М. Дейчмейстер

20. 1967. 11

20

$\text{NH}_4\text{MoO}_2\text{F}_3$

BQ-VII-6572

1972

Mattes R., Müller C. et al.

(V:) Z. anorg. und ally. Chem, 1972
389, n2, 177-187 (new)

Pre. Rec. 1972, 195229

$(\text{NH}_4)_2\text{MoS}_4$; $(\text{NH}_4)_2\text{MoOS}_3$;

1972

10 Д374. Лазерные спектры комбинационного рассеяния ионов MoS_4^{2-} , WS_4^{2-} , MoOS_3^{2-} и WOS_3^{2-} в водных растворах и соответствующих кристаллических щелочных солей. Müller A., Weinstock N., Schulze H. Laser-Raman-Spektren der Ionen MoS_4^{2-} , WS_4^{2-} , MoOS_3^{2-} und WOS_3^{2-} in wässriger Lösung sowie der entsprechenden kristallinen Alkalisalze. «Spectrochim. acta», 1972, A28, № 6, 1075—1082 (нем.; рез. англ.)

Исследованы спектры комб. рас. (КР) и ИК-спектры солей M_2MoS_4 (I), M_2WS_4 (II), M_2MoOS_3 (III) и M_2WOS_3 (IV), где $\text{M} = \text{NH}_4$, K, Rb и Cs, в водных растворах и в твердом состоянии. В спектрах водных растворов I и II наблюдается сильная поляризованная

(+74)

р. 1972. 10

IX

линия, идентифицированная как $\nu_1(A_1)$ полносим. вал. кол. ионов MoS_4^{2-} (458 см^{-1}) и WS_4^{2-} (479 см^{-1}), и деполаризованная линия, отнесенная к комбинации колебаний $\nu_2(E) + \nu_4(F_2)$. Колебание $\nu_3(F_2)$ проявляется в виде плеча на полосе $\nu_1(A_1)$. В спектрах КР водных растворов III и IV полносим. вал. кол. MoS и WS идентифицированы как $\nu_2(E)$ колебания, а к колебанию $\nu_1(A_1)$ отнесено вал. кол. $\nu(\text{Mo—O})$, слабая поляризованная линия которого лежит $\sim 855 \text{ см}^{-1}$ (III) и 880 см^{-1} (IV). В спектрах кристаллич. солей наблюдается мультиплетное расщепление ряда полос. Приведены спектры и таблицы частот. Библ. 19. Э. В. Б.

1973

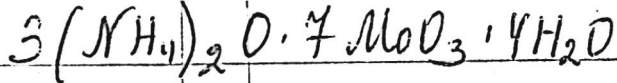
MoN_2 ;

MoN_2^- ; MoN_2^+ ;

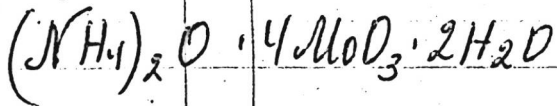
Vinogradova E.M. Doped¹ Mo Ti₂C.
Zh. Fiz. Khim. 1973, 47(4), 239-25.

Декр. ступ.
расши

(ссл. TiN_2 ; III)



1975



Шамсоро К.
и др.

Надп. тр. Вее.

Н.-И. и проект.

и-та музонав.

и.к. специф. сем. и мб. сн.авт
1975, 15, 256-61.

(сн. H_2MoO_4 ; III)

Mo₂N

1977

Эл. спектры и фазовый состав

87: 175304a Electronic absorption spectrum of molybdenum nitride (Mo₂N). Kabankova, N. N.; Moskvitina, E. I.; Kuzyakov, Yu. Ya. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim.* 1977, 18(3), 362-5 (Russian). The absorption spectra of Mo₂N was measured in the region 5900-6400 Å. The Mo₂N was prepd. by flash discharge through gaseous mixts. of MoCl₅ contg. N₂. The red region system was analyzed as ${}^2\Sigma \leftarrow X^2\Pi$ electronic transitions. The values of ν_1 (675 cm⁻¹), ν_3 (286 cm⁻¹), $\omega_2' - \omega_2''$ (82 cm⁻¹) and ω_2'' (16 cm⁻¹) were calcd.

C. A. 1977. 87. N22

Mo₂N

1977

3 Б178. Электронный спектр поглощения нитрида молибдена. Кабанкова Н. Н., Москвитина Е. Н., Кузьяков Ю. Я. «Вестн. Моск. ун-та. Химия», 1977, 18, № 3, 362—365 (рез. англ.)

С помощью импульсного источника непрерывного излучения (длительность импульса 30 мксек) измерены электронные спектры поглощения продуктов, образующихся при прохождении импульсного разряда через смесь паров пентахлорида молибдена и азота (длительность свечения 200 мксек, ¹⁴N₂, ¹⁵N₂ и их смесь 1:1). Спектры измеряли при различной временной задержке между импульсами разряда и источника. В области 5900—6400 Å обнаружена система полос с красным оттенением. На основании анализа изотопных сдвигов по ^{14,15}N установлено, что молекула содержит один атом азота (предполагается, что это Mo₂N). Положение

спектр.
спектр

М. Н.

2, 1978, 113

наблюдаемых полос (в Λ) и их отнесение: полоса 000—000, переход ${}^2\Sigma-{}^2\Pi_{3/2}$, R — кант — 6220,38, Q — кант — 6244,68 и 6245,98; 010—010 — ${}^2\Pi-{}^2\Sigma$ 6248,77 (R), 6263,69 (Q), ${}^2\Pi-{}^2\Delta$, 6256,25 (R), 6276,67 (Q), ${}^2\Pi-{}^2\Sigma$, 6264,83 (R), 6284,0 (Q); 020—020 — ${}^2\Sigma-{}^2\Pi$, 6272,24 (R), 6292,8 (Q), 030—030 — ${}^2\Pi-{}^2\Sigma$, 6297,2, 6299,9, 6302,2 (R), ${}^2\Pi-{}^2\Sigma$, 6319 (R); 100—000, ${}^2\Sigma-{}^2\Pi_{3/2}$, 5965,08 (R), 5991,91 (Q); 110—010, ${}^2\Pi-{}^2\Sigma$, 5990,72 (R), 6020,9 (Q); 011—010, ${}^2\Pi-{}^2\Sigma$, 6123,82 (R), 6148,34 (Q); 001—000, ${}^2\Sigma-{}^2\Pi_{3/2}$, 6110,70, 6123,56 (R), 6135,22 (Q); 002—000, ${}^2\Sigma-{}^2\Pi_{3/2}$, 6009,6, 6011,6 (R). Расщепление в полосе 010—010 связывается с эффектом Реннера — Теллера, $\epsilon\omega_2'' = 16 \text{ см}^{-1}$. Частоты полносимм. и антисимм. колебаний в возбужденном состоянии равны соотв. 675 и 286 см^{-1} , $\Delta\nu_{\text{деф.}} = \nu' - \nu'' = 82 \text{ см}^{-1}$. В. М. Ковба

MoN
MoO
Mo₂

спектр
поглощ.
Di

(+2) $\square$

2.10.80.1144

ПТБ170. Спектры поглощения двухатомных молекул нитрида молибдена (MoN) оксида молибдена (MoO) и димера молибдена (Mo₂) изолированных в Ar, Ne и Kr-матрицах. Bates J. K., Gruen D. M. Absorption spectra of diatomic molybdenum nitride

(MoN) molybdenum oxide (MoO), and molybdenum dimer (Mo₂) molecules isolated in Ar, Ne, and Kr matrices. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 78, № 2, 284—297 (англ.)

Измерены спектры поглощения молекул MoN, MoO и Mo₂ и спектр испускания MoN, изолированных в матрице (Ne, Ar, Kr T=4,2 и 13 K). Для получения молекул MoN, MoO и Mo₂ использован метод катодного распыления (Mo-катод, Pt-анод, газ—распылитель—аргон с добавками ¹⁴N₂, ¹⁵N₂ или ¹⁶O₂, ¹⁸O₂). В спектре поглощения MoN выделены три системы полос, отнесенных к переходам $B^4\Sigma - X^4\Sigma_{1/2}^-$ (0—0,1—0,2—0, 420—465 нм), $A^4\Pi_{1/2} - X^4\Sigma_{1/2}^-$ (0—0,1—0,

580—620 нм) и $A^4P_{3/2} - X^4\Sigma_{1/2}^-$ (0—0, 1—0, 570—635 нм). Значения $\Delta G_{1/2}$ для $\text{MoN}(\text{Ar})$ равны, соотв., 949, 954 и 971 см^{-1} ; $\Delta G_{3/2}(B-X) = 936 \text{ см}^{-1}$. Часть

полос лежащих в области 600—655 нм не отнесена. Положение и относит. интенсивность полос существенно зависят от матрицы. Приведена схема МО молекулы MoN и схема уровней энергии MoN по эксперим. данным для газовой фазы. Обсуждаются возможные переходы, тип основного электронного состояния молекулы MoN . Из спектра испускания получено значение частоты колебания $\text{MoN}(\text{Ar})$ в основном электронном состоянии, $\omega_e = 1040 \text{ см}^{-1}$, к-рое согласуется с учетом матричного сдвига с оценкой сделанной с помощью соотношения Кратцера. В спектре MoO наблюдалось два дублета — в области 690—700 нм и 650—660 нм отстоящих друг от друга на $\sim 855 \text{ см}^{-1}$ и интерпретированных как полосы 0—0 и 1—0, соотв. Какой либо определенной корреляции между полученными полосами и спектром газовой фазы провести не удалось. В ИК-спектре MoO наблюдались полосы 893,5 (Mo^{16}O) и 850 см^{-1} (Mo^{18}O). В спектре молекулы Mo_2 (Ar, Kr-матрицы) наблюдалась прогрессия полос в области 500—544 нм, $\Delta \bar{G} \sim 181 \text{ см}^{-1}$. В спектре $\text{Mo}_2(\text{Ne})$ наблюдалась только одна очень интенсивная полоса 515 нм.

В. М. Ковба

011 8890

1979

MoN
MoO
Mo₂

М.П.; И.
W

(42) ☒

ф. 1980/15

5 Д335. Спектры поглощения двухатомных молекул MoN, MoO и Mo₂, изолированных в Ar-, Ne- и Kr-матрицах. Absorption spectra of diatomic molybdenum nitride (MoN), molybdenum oxide (MoO), and molybdenum dimer (Mo₂) molecules isolated in Ar, Ne, and Kr matrices. Bates J. K., Gruen D. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 78, № 2, 284—297 (англ.)

В видимой области спектра (15 000—25 000 см⁻¹) получены спектры поглощения двухатомных молекул Mo, MoO и Mo₂, изолированных в Ar-, Ne- и Kr-матрицах при т-рах 4,2 и 13° К. Образование исследованных молекул перед внедрением в матрицу происходило в разряде с полым катодом. В спектрах идентифицированы полосы, относящиеся к системе переходов $A^4\pi \rightarrow X^4\Sigma^-(a)$ и $B^4\Sigma \rightarrow X^4\Sigma^-(a)$ молекулы MoN. Установлено значение параметра ω_e для MoN в основном состоянии $X^4\Sigma^-$: 1040 см⁻¹ в Ar-матрице, а также получены некоторые спектроскопич. константы, характеризующие молекулы MoO и Mo₂ в матрицах (энергии переходов, колебательные частоты и др.). Отмечено, что данные, полученные для MoN хорошо коррелируют с результатами исследований этой молекулы в газовой фазе. Библи. 27.

М. Т.

BM 8890

1979

MoN

MoO

Mo₂

(u, n)

(+2) ☒

92: 13181j Absorption spectra of diatomic molybdenum nitride (MoN), molybdenum oxide (MoO), and molybdenum dimer (Mo₂) molecules isolated in argon, neon, and krypton. Bates, J. K.; Gruen, D. M. (Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 78(2), 284-97 (Eng). MoN and MoO mols. produced in a hollow cathode discharge were trapped in Ne, Ar, and Kr matrixes at 4.2 and 13 K and investigated by optical absorption spectroscopy. Bands attributed to MoN were identified in the red and blue spectral regions and assigned by comparison with gas phase results to the $A^4\Pi \rightarrow X^4\Sigma^-$ (a) and $B^4\Sigma^- \rightarrow X^4\Sigma^-$ (a) transitions, resp. The ground state of Mo¹⁴N was identified as $^4\Sigma^-$ with $\omega_e = 1040$ cm⁻¹ in an Ar matrix. Absorptions assigned to MoO in the red spectral region form the (0-0) and (1-0) bands of at least 1 electronic transition, but could not definitely be correlated with the gas phase results. The ground state vibrational frequency for Mo¹⁶O in an Ar matrix is 893.5 cm⁻¹. Addnl., Mo₂ absorptions centered at 19,305 cm⁻¹ were part of a vibrational progression with an av. spacing of 181 cm⁻¹.

C.A. 1980.92, N2

Mo₂N
(3)

1979

Korsunskii, M. Y.
et al.

Fiz. Tverd. Tela Metallo-
fiz., Tr. Resp. Konf.
1975 (Pub. 1979), 98-100

(ср. Mo₂B₅; III)



1980

Bursten B.E., et al

расчет
м. строен.

J. Amer. Chem. Soc., 1980,
102, n 14, 4549-86.



MoN

Оттиск 14137 1982

19 Б262. Исследования методом ЭПР MoN и атомов Mo в матрицах неона, аргона и криптона. Использование источников ионного распыления с полым катодом для экспериментов ЭПР с изоляцией в матрицах. Knight Lon B., Steadman Jhobe. ESR investigation of MoN and Mo atoms in neon, argon, and krypton matrices: utilization of a hollow cathode ion sputter source for ESR matrix experiments. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 7, 3378—3384 (англ.)

основное
состояние,
спектры

ЭПР в матрицах

Для получения и исследования нитридов металлов и др. радикалов методом ЭПР с изоляцией в матрицах применен источник ионного распыления с полым катодом. Полученные спектры ЭПР MoN свидетельствуют в пользу предположения об основном электронном состоянии $^4\Sigma$, хотя наблюдаемые необычные т-рные эффекты не исключают возможность существования очень низко расположенных возбужденных состояний. Про-

х. 1982, 19, N 19.

анализированы величины констант СТС в спектрах ^{95}MoN и ^{97}MoN в неоновой, аргоновой и криптоновой матрицах. В случае ^{95}MoN при 4 К в неоновой матрице параметры спектра ЭПР составляют: $g_{\perp}=1,969$, $A_{\perp} (^{95}\text{Mo})=506,3$, $A_{\parallel} (^{95}\text{Mo})=480$, $A_{\text{изо}}=498$, $A_{\text{дип}}=-9$ МГц. Электронная структура MoN сопоставлена со структурой изоэлектронных радикалов NbO и VO. Атомы Mo получены как термич. методом, так и методом ионного распыления. Величина параметров спектров ЭПР ^{95}Mo в основном состоянии 7S_3 при 10 К в аргоновой матрице составляет: $g=2,000$; $A=237$ МГц.

Из резюме



$Mo_2 \cdots N_2$

поверх. потенц.
энергии,
расчет.

1982

1 Б39. Квантовохимическое изучение взаимодействия молекулы N_2 с двухъядерными кластерами молибдена. Шукарев А. В., Корольков Д. В. «Вестн. ЛГУ», 1982, № 16, 40—47 (рез. англ.)

Полуэмпирич. методом Малликена — Вольфсберга — Гельмгольца рассчитана поверхность потенциальной энергии взаимодействия молекулы N_2 с двухъядерным кластером Mo_2 для «спиро-формы» модельного комплекса $Mo_2 \cdots N_2$. Показано, что при такой координации молекулы N_2 на кластере с эффективными электронными взаимодействиями $M-M$ происходит ее разрушение с малыми энергетич. затратами; оцененная энергия активации приблизительно равна 10 ккал/моль. Ведущая роль кратных связей $M-M$ в двухъядерном комплексе переходного металла («кластерный эффект») в процессе разрушения молекулы N_2 подтверждена результатами расчетов электронной структуры двухъядерных комплексов молекулярного азота $[P_4ClRe(N_2)MoOCl_4]$ без связей $M-M$ и $[Mo_2Cl_8(N_2)]^{3-}$ с кратной связью $M-M$.

Автореферат

X. 1983, 19, N1.

MoN

| Om. 17903 |

1983

100: 12894r The lower electronic states of molybdenum mono-nitride. Allison, Janet N.; Goddard, William A., III (Arthur Amos Noyes Lab. Chem. Phys., California Inst. Technol., Pasadena, CA 91125 USA). *Chem. Phys.* 1983, 81(3), 263-71 (Eng). Generalized-VB calcs. showed that the ground state of MoN($^4\Sigma^-$) has a covalent triple bond, where the σ bond is $d\pi$ -like on the Mo, leading to a quartet state with unpaired electrons in the Mo 5s, Mo 4d δ_{xy} , and Mo 4d $\delta_{x^2-y^2}$ orbitals. The first excited state ($^4\Pi$) corresponds to the 5p $\pi \rightarrow$ 5s excitation. The calcd. properties of $R_e = 1.60$ Å, $\omega_e = 1100$ cm $^{-1}$, $D_e = 4.07$ eV, and $\Delta E(^4\Pi \rightarrow ^4\Sigma^-) = 2.128$ eV agree with recent exptl. results ($R_e = 1.63$ Å and $\Delta E = 2.011$ eV). Particularly interesting is a dramatic non-monotonic change of the dipole moment with distance ($\mu = -3.123$ D at $R_e = 1.60$ Å, -5.982 D at $R = 2.60$ Å, and $\mu = -0.176$ D at $R = 5.0$ Å). This effect is explained.

X $^4\Sigma^-$, best.
 cocrm, meep.
 pacrem, de n.

c.A. 1984, 100, N2

MoN

Ом. 17903 1983.

3 Д45. Низшие электронные состояния MoN. The lower electronic states of MoN. Allison Janet N., Goddard William A., III. «Chem. Phys.», 1983, 81, № 3, 263—271 (англ.)

Обобщенным методом валентных связей с последующим учетом ограниченного конфигурац. взаимодействия рассчитаны потенциальные кривые и спектроскопич. постоянные низших состояний $^4\Sigma^-$ и $^4\Pi$ молекулы MoN. Для атома Mo в расчете использовался эффективный релятивистский основной потенциал. Базис АО включал наборы сгруппированных гауссовых ф-ций — $[3s4p2d]$ на Mo и $[3s2p]$ на N. Найдено, что состояние $^4\Sigma^-$ является основным и имеет параметры: $R_e = 1,60 \text{ \AA}$, $\omega_e = 1100 \text{ см}^{-1}$, $D_e = 4,07 \text{ эВ}$. Терм $^4\Pi$ расположен выше $^4\Sigma^-$ на 2,128 эВ. Кроме того, для обоих состояний рассчитаны ф-ции дипольного момента, показывающие аномально сильное изменение дипольного момента при вариации межъядерного расстояния, построены контурные карты орбитальных электронных плотностей и обсуждена природа химич. связи. А. И. Дементьев

М.П., &,
потенц. крив.

ср. 1984, 18, 1.3

MoN

Am. 17903 1983

6 B1012. Нижние электронные состояния MoN. The lower electronic states of MoN. Allison Janet N., Goddard III William A. «Chem. Phys.», 1983, 81, № 3, 263—271 (англ.)

Методами ССП МО ЛКАО, обобщенных валентных схем (ОВС), ОВС с наилучшим спариванием (ОВС НС) и ОВС с ограниченным учетом взаимодействия конфигураций (ОВС КВ) рассчитаны электронное строение, потенциальные кривые и спектроскопич. постоянные низших электронных состояний $^4\Sigma^-$ и $^4\Pi$ молекулы MoN. Во всех вышеупомянутых методах использовано приближение релятивистского эффективного основного потенциала для атома Мо. В результате анализа заселенностей МО и контурных карт валентных орбиталей установлено, что основное состояние $^4\Sigma^-$ характеризуется ковалентной тройной связью с незаполненными электронами на орбиталях Мо 5s, Мо 4d δ_{xy} .

расчет δ_i ,
м.п.

х. 1984, 19, № 6

и $\text{Mo } 4d \delta_{x^2-y^2}$. Состояние $^4\Pi$ обусловлено возбуждением $5p \pi \leftarrow 5s$. Вычисл. спектроскопич. постоянные основного состояния MoN $R_e = 1,60$ А, $\omega_e = 1100$ см^{-1} , $D_e = 4,07$ эВ и энергия возбуждения $\Delta E(^4\Pi - ^4\Sigma^-) = 2,128$ эВ хорошо согласуются с эксперим. значениями $R_e = 1,63$ А, $\Delta E = 2,011$ эВ. Для состояний $^4\Sigma^-$ и $^4\Pi$ исследована зависимость дипольного момента μ от межъядерного расстояния R . Обнаружены немонотонные изменения μ с расстоянием R , что объяснено существенными перераспределениями заряда при изменении R .

И. А. Тополь



$\text{Mo}_x(\text{N}_2)$

$x = 1, 2, 3$

и др.

Ом. 16767 1983

18 Б1217. Фотохимическое образование и диссоциа-

ция динитроазотмолибденовых комплексов в криптоновых матрицах. Photochemical formation and dissociation of molybdenum-dinitrogen complexes in krypton matrices. Foosnaes T., Pellin M. J., Gruen D. M. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 6, Pt 1, 2889—2898 (англ.)

Получены комплексы $\text{Mo}(\text{N}_2)$, $\text{Mo}_x(\text{N}_2)$ и $\text{Mo}(\text{N}_2)_3$ (где $x = 1, 2, 3$) в Кг-матрице при 14 К при совместном осаждении Мо в потоке Кг и N_2 и облучении светом Нг-лампы мощностью 1 кВт. Идентификацию образующихся частиц производили по спектрам поглощения в УФ-, ИК- и видимой областях спектра при использовании изотопов азота $^{15}\text{N}_2$, $^{14}\text{N}_2$. Образование комплексов в Кг-матрице идет, по-видимому, с участием фотовозбужденных атомов Mo^* (резонансный переход $^7\text{S}^7\text{P}$ при 355 нм). По спектрам рассчитаны силовые констан-

Спектр,
шир. пост.

Х. 1983, 19, № 18

ты, равные $17,21 \pm 0,02$ мдин/А для MoN_2 и $f_r =$
 $= 18,72$ мдин/А и $f_{rr} = 0,36$ мдин/А для $\text{Mo}(\text{N}_2)_3$.
Незначит. образование комплексов идет и в процессе
соосаждения в отсутствие облучения. Поглощение света
в электронных полосах поглощения индивидуальных
комплексов приводит к их селективной фотодиссоциации.
Т. К. Лавровская

MoN₂

Mo_x(N₂)

Mo(N₂)₃

спектр в
матрицах,
сил. лост.

ср. 1983, 18, N10

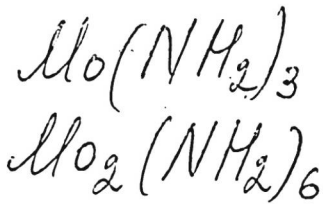
DM. 16767

1983

10 Д555. Фотохимическое образование и диссоциация диазо-комплексов молибдена в криптоновых матрицах. Photochemical formation and dissociation of molybdenum—dinitrogen complexes in krypton matrices. Foosnaes T., Pellin M. J., Gruen D. M. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 6, Pt 1, 2889—2898 (англ.)

В области 200—600 нм получены спектры поглощения изолированных в Кг-матрицах комплексов MoN₂, Mo_x(N₂) и Mo(N₂)₃. Образование комплексов происходит в результате облучения смеси охлажденных до 14 К атомов Mo и молекул азота, растворенных в матрице, светом Hg-лампы. С использованием изотопного эффекта определены силовые константы связей Mo—N. Установлено, что облучение комплексов в их полосах поглощения приводит к фотодиссоциации. По эксперим. данным построены корреляционные зависимости между интенсивностью поглощения комплексами

в УФ-, видимой и ИК-областях спектра. Эти корреляции обсуждены с точки зрения роста концев и распада исследованных комплексов в матрицах. Библ. 31.
М. Т.



1983

Ziegler Tom.

расшир.
коллектр.,
структ.,
с. н., Do;

J. Amer. Chem. Soc.,
1983, 105, N 26, 7543-
- 7549.

● (сир. C_2H_3 ; III)

MoN

28.39138

1985

9 Л238. Анализ вращательной структуры спектра испускания нитрида молибдена (MoN) в красной области. Rotational analysis of the red electronic emission spectrum of molybdenum nitride (MoN). Carlson R. C., Bates J. K., Dunn T. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 2, 215—241 (англ.)

Изучена вращательная структура системы красных эмиссионных полос MoN, образующегося при микроволн. возбуждении смеси $^{94}\text{MoCl}_5$ (обогащение 85%) с азотом $^{15}\text{N}_2$ в потоке буферного гелия. Показано, что полосы в спектрах с максимумами на 6305, 6245, 6123 и 6996 Å являются компонентами (0,0)-полосы перехода $^4\Pi(a) \rightarrow ^4\Sigma^-(a)$. Отмечена большая величина нулевого расщепления ($\sim 86 \text{ см}^{-1}$) терма $^4\Sigma^-$ MoN. Обсуждена возможность использования полученных результатов для идентификации нитрида молибдена в спектрах звезд М- и S-типа. Библ. 40. В. К. Р.

(Э. М. П.)

ср. 1986, 18, 49

MoN

1985

18 Б1205. Вращательный анализ электронного спектра испускания нитрида молибдена (MoN) в красной области. Rotational analysis of the red electronic emission spectrum of molybdenum nitride (MoN). Carlson R. C., Bates J. K., Dunn T. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 2, 215—241 (англ.)

Сфотографирован спектр испускания молекулы MoN, возбуждаемый в МВ-разрядном источнике, содержащем MoCl_5 (~85% ^{94}Mo) и $^{14}\text{N}_2$ ($^{15}\text{N}_2$). Система полос в обл. 600—635 нм отнесена к переходу $^4\Pi(a) (v'=0) \rightarrow X^4\Sigma^-(a) (v''=0)$ (a — тип связи по Гунду). Отмечена большая величина расщепления между компонентами $^4\Sigma_{-3/2}^-$ и $^4\Sigma_{-1/2}^-$ (85,9 см^{-1}) и нерегулярный характер мультиплетного расщепления в состоянии $^4\Pi$. Измерена и проанализирована вращат. структура полос. Приведены значения вращат. постоянных (B, D), параметров Ω - и Λ -удвоения (ρ, q, o), спин-спинового (ϵ, α) и спин-

(MoN)

X. 1986, 19, N 18

вращат. (γ) взаимодействия для указанных подсостояний. Молек. постоянные $\text{MoN}(^4\Pi)$ (в см^{-1}): $T_{-1/2} = 15898,84$, $T_{1/2} = 15963,26$, $T_{3/2} = 16282,73$, $T_{5/2} = 16718,48$, $B = 0,50380$, $\epsilon = -0,152655$, $\alpha = 2,0096$, $p = 0,025970$, $q = -1,9445 \cdot 10^{-4}$, $\gamma = 0,07413$, $A_D = 4,0295 \cdot 10^{-4}$, $D = 4,8072 \cdot 10^{-7}$.

В. М. Ковба



MoN

(Qm. 23 497)

1985

102: 175470e Rotational analysis of the red electronic emission spectrum of molybdenum nitride (MoN). Carlson, R. C.; Bates, J. K.; Dunn, T. M. (Dep. Chem., Univ. Michigan, Ann Arbor, MI 48109 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 110(2), 215-41 (Eng). A system of emission bands in the red region of the optical spectrum was identified as due to the species MoN. The system was generated by the microwave (2450 MHz) excitation of a flowing mixt. of MoCl₃ and mol. N in a stream of He, but is also obsd. in a d.c. arc in air between Mo electrodes. One of the Q-form branches has previously been assumed to be an at. line of Mo I. The system was assigned as the 0.0 band of a $^1\Pi(a) \rightarrow X^4\Sigma^-(a)$ transition, with a large zero-field splitting of the ground $^4\Sigma^-$ term (~ 86 cm⁻¹). A preliminary search was made to detect the presence of MoN in M-type stars.

(a¹Π → X⁴Σ⁻)
francium
atany

C. A. 1985, 102, N20

MoN

1985

Van Vechten D.,
Bauer N., et al.

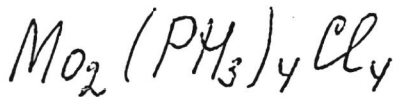
спектр

элементарно-
массов.

MoCl₅

J. Phys. Chem. 1985,
89 (9), 1559-61.

( сел. TiN; III)

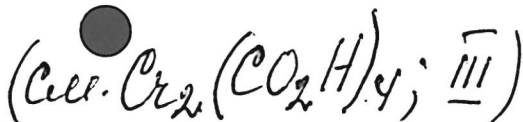


1985

Ziegler T.

Рассет
данных.
связей,
связ. помет.
электрон.
строения.

J. Amer. Chem. Soc.,
1985, 107, N 15, 4453 -
- 4459.



№ N

1986

электрон.
спектр
полюсов, м.п.

Комплексное исследование
влияние термодинамики.
св-в и структурных
постоянных (заключе-
чительный отчет),
МГУ, Химфак, 1986,
стр. 52-59. ●

52-59

MoN

(om. 30248)

1986

Pazyuk E.A., Moskviti-
na E.N., Kizyakov Yu.Ya.

u.n. Spectrosc. Lett., 1986,
19, N 6, 627-638.

MoN

1986

7 Л220. Колебательный анализ электронного перехода $^4\Pi \rightarrow ^4\Sigma$ молекулы MoN. Пазюк Е. А., Москвитина Е. Н., Кузяков Ю. Я.; Ред. ж.». Вестн. МГУ. Химия, М., 1986, 14 с. Библиогр. 7 назв. Рус. (Рукопись деп. в ВИНТИ 02.04.86, № 2270-В)

Получен электронный спектр поглощения молекулы MoN в области 550—700 нм высокоэффективным методом внутрирезонаторной лазерной спектроскопии. Получено 48 полос, отнесенных к переходу $^4\Pi \rightarrow ^4\Sigma$. Проведен колебательный анализ данного перехода и определены молекулярные постоянные: $\omega_e'' = 1106,7 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e'' X_e'' = 6,3 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e = 980,9 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e' X_e = 3,7 \text{ см}^{-1}$. Определены значения мультиплетного расщепления в основном ($^4\Sigma$) и возбужденном ($^4\Pi$) состояниях.

Автореферат

477-45

до 1986, 18, № 7.

Нитриды Mo 1987
Ivanovskii A. L.,
Novikov D. L., et al.

Электрон. Phys. Status Solidi
соев. соед. В 1987, 14 (1), 9-33.

(сое. ● Карбиды Cr; III)

MoN

Am. 30 242

1987

107: 144040p Experimental and theoretical investigations of electronic structure and spectra of molybdenum mononitride. Pazyuk, E. A.; Moskvitina, E. N.; Kovba, V. M.; Topol, I. A. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1987, 28(2), 10-16 (Russ). By the method of intracavity laser spectroscopy the electronic absorption spectra was measured of MoN and by the X_α-RV method, and its electronic structure was calcd.

(crkmp)

C.A. 1987, 107, N 16

MoN

Ом. 30242

1987

16 Б1015. Экспериментальное и теоретическое исследование электронной структуры и спектров молекулы MoN. Пазюк Е. А., Москвитин Е. Н., Ковба В. М., Тополь И. А: «Ж. структур. химии», 1987, 28, № 2, 10—16

Методом внутрирезонаторной лазерной спектроскопии измерены электронные спектры поглощения молекулы MoN и методом X_α -рассеянных волн рассчитана ее электронная структура. Резюме

М.Н.

Х. 1987, 19, № 16

MoN

Am. 30242

1987

8 Д313. Экспериментальное и теоретическое исследование электронной структуры и спектров молекулы MoN. Пазюк Е. А., Москвитина Е. Н., Ковба В. М., Тополь И. А. «Ж. структур. химии», 1987, 28, № 2, 10—16

Методом внутривибрационной лазерной спектроскопии измерены электронные спектры поглощения молекулы MoN и методом Х α —РВ рассчитана ее электронная структура.

Резюме

М.Н.

ф. 1987, 18, 48

MON

1988

Березин А. Б., Котлов
Д. И.

${}^4\Pi - {}^4\Sigma$

20 Всес. съезд по спек-
троскопии, Киев, сентя.
1988; Тез. докл. Ч. 1. Киев,
1988. С. ● 252.

(см. NBO; III)

MoN

M 30143

1988

109: 158289s The $A^4\Pi-X^4\Sigma$ system of the molybdenum nitride (MoN) molecule. Pazyuk, E. A.; Moskvitina, E. N.; Kuzyakov, Yu. Ya. (Dep. Chem., Moscow M. Lomonosov State Univ., 119899 Moscow, USSR). *Spectrosc. Lett.* 1988, 21(5), 447-64 (Eng). The absorption spectrum of MoN was obtained at 500-670 nm by intracavity laser spectroscopy. Vibrational anal. of $A^4\Pi-X^4\Sigma$ transition was carried out. Mol. consts. for the upper ($A^4\Pi$) and ground ($X^4\Sigma$) states were detd.

($A^4\Pi-X^4\Sigma$)
MoN.

C.A. 1988, 109, N 18

MoN

1989

† 18 Б1170 ДЕП. Анализ колебательной структуры
оранжевой системы полос молекулы MoN / Бере-
зин А. Б., Дмитрук С. А., Катаев Д. И. // Ред. ж.
Вестн. МГУ. Химия.— М., 1989.— 7 с.— Библиогр.:
3 назв.— Рус.— Деп. в ВИНТИ 14.06.89, № 3981-В89

В лазерном факеле получены молекулы MoN. Флуо-
ресцентным методом выполнен анализ колебат. струк-
туры системы полос ${}^4\Pi-{}^4\Sigma\text{-MoN}$ в обл. 560—670 нм.
Выделены 8 подсистем до $\nu'=2$ и $\nu''=3$. Приведена
таблица 76 кантов подполос, многие — с изотопной
структурой по молибдену. Автореферат

М.П.

Х. 1989, № 18

MoN

1989

9 Л231 ДЕП. Анализ колебательной структуры
оранжевой системы полос молекулы MoN. / Бере-
зин А. Б., Дмитрук С. А., Катаев Д. И.; Ред. ж. Вестн.
МГУ. Химия.— М., 1989 г.— 7 с.— Библиогр.: 3 назв.
— Рус.— Деп. в ВИНТИ 14.06.89, № 3981—В89

В лазерном факеле получены молекулы MoN. Флуо-
ресцентным методом выполнен анализ колебательной
структуры системы полос ${}^4\Pi-{}^4\Sigma$ MoN в области
560—670 нм. Выделены 8 подсистем до $\nu'=2$ и $\nu''=3$.
Приведена таблица 76 кантов подполос, многие — с
изотопной структурой по молибдену. Автореферат

М-1.

сб. 1989, № 9

[Om. 31909]

1989

$[MoCl_4(NCl)]_2$

Frankenau A., Dehnicke K.,

cremp

Z. Naturforsch. 1989,

44B, N 4, 493-494

Synthese und

● IR-Spekt-

run von $[\text{MoCl}_4(\text{NCE})]_2$.

MoN

Om 33142

1990

, 113: 87395f Application of laser fluorescence to molecular-spectrum analysis. The orange system of molybdenum mononitride molecule. Berezin, A. B.; Dmitruk, S. A.; Kataev, D. I. (USSR). Opt. Spektrosk. 1990, 68(3), 533-8 (Russ). Fluorescence spectra and fluorescence excitation spectra were used for anal. of mol. spectrum of MoN. The wings of the eight 0-0 forbidden subsystems were obtained including a series of subbands to $v' = 2$ and $v'' = 3$. The contours of the ${}^4\Pi-{}^4\Sigma_{3/2}$ subbands were of the same type, while these of ${}^4\Pi-{}^4\Sigma_{1/2}$ strongly depended on the difference of the effective rotational consts. Electronic terms and vibrational consts. were detd. for ${}^{98}\text{MoN}$. The MoN mols. were produced by laser evapn. of Mo in low pressure N.

${}^4\Pi-X{}^4\Sigma$

конфам.

НОСМ. И ФЛЕКТ.
мем

С. А. 1990, 113, № 10

Мо №

1991

Країник В. В.,
Иващенко В. И. и др.

Математическая.

1991, 13, № 1. С. 102 -
107.

(с. Мо № ; I)

MoN

1993

119: 191101s Molecular beam optical Stark spectroscopy of molybdenum nitride (MoN). Fletcher, D. A.; Jung, K. Y.; Steimle, T. C. (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(2), 901-5 (Engl). A high resolu. optical spectroscopic study of a molybdenum mononitride, MoN, supersonic mol. beam sample has been performed. The R_{00} (0,0) branch feature of the (0,0) $A^4\Pi_{3/2}-X^4\Sigma_{1/2}$ band system for ^{96}MoN was recorded as a function of static elec. field

strengths of up to 3.5 kV/cm. The splittings and shifts were analyzed to produce values of the permanent elec. dipole moment of 4.56(9) and 3.38(7)D for the $A^4\Pi_{3/2}$ and $X^4\Sigma_{1/2}$ states, resp. The field free splittings for the ^{96}MoN and ^{98}MoN isotopic forms were interpreted as arising from $X^4\Sigma_{1/2}$ magnetic hyperfine effects and the resulting spin d. of 5.09(6) a.u.⁻³ was detd. Comparisons with predictions from theor. models are given.

$(A^4\Pi_{3/2}-X^4\Sigma_{1/2})$

C. A. 1993, 119, N 18

MoN

1994

121: 68578s Rotational analysis of the $A^4\Pi_r-X^4\Sigma^-$ band system of molybdenum nitride (MoN). Jung, K. Y.; Fletcher, D. A.; Steimle, T. C. (Dep. Chem. Biochem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 165(2), 448-56 (Eng). The high-resoln. laser-induced fluorescence spectrum of a supersonic mol. beam sample of molybdenum nitride, MoN, was recorded in the 596- to 633-nm spectral range. The $A^4\Pi_r-X^4\Sigma^-$ band system of the ^{92}Mo , ^{94}Mo , ^{96}Mo , ^{98}Mo , and ^{100}Mo isotopic forms was analyzed to produce an improved set of spectroscopic parameters. The isotopic dependence of the parameters is discussed and a comparison with a previous rotational anal. is given.

$A^4\Pi_r-X^4\Sigma^-$

C. A. 1994, 121, n6

1994

F: MoN

P: 3

2Б1211. Лазерное спектроскопическое исследование перехода $A\{4\}'\Pi\text{-}X\{4\}'\Sigma\{-\}$ MoN. Laser spectroscopic study of the $A\{4\}'\Pi\text{-}X\{4\}'\Sigma\{-\}$ transition of MoN / Sze N. S.-K., Cheung A. S.-C. // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. - 1994. - 52, N 2. - С. 145-150. - Англ.

В области 599-633 нм методом лазерной флуоресценции исследованы переходы $A\{4\}'\Pi(v'=0)\text{-}X\{4\}'\Sigma(v''=0-2)$ пяти изотопных модификаций молекулы MoN ($\{92,94,96,\}98,100\text{MoN}$). Значения ' ω_e ' и ' $\omega_e x_e$ ' (в см^{-1}) для указанных изотопомеров в основном электронном состоянии $X\{4\}'\Sigma\{-\}$: 1059,2; 1057,0; 1055,8; 1053,7; 1052,5; 4,8; 4,7; 4,5; 4,4. Молекулы MoN получали при взаимодействии паров MoCl₅ с азотом, предварительно пропущенным через микроволновый разряд.

Р.Ис.Х. №2, 1996.

MoN

1994

/ 121: 240933s Laser spectroscopic study of the $A^4\Pi-X^4\Sigma^-$ transition of MoN. Sze, N. S.-K.; Cheung, A. S.-C. (Department of Chemistry, University of Hong Kong, Hong Kong, Hong Kong). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1994, 52(2), 145-50 (Eng). $A^4\Pi-X^4\Sigma^-$ transitions, (0, 0), (0, 1) and (0, 2) of MoN between 5990-6330 Å were studied using wavelength-resolved laser-induced fluorescence spectroscopy. MoN was produced by reacting vaporized MoCl₅ with microwave discharged N₂ gas. The ground state $X^4\Sigma^-$ vibrational consts. ω_e and $\omega_e x_e$ of different isotopic mols. were detd. • (cm⁻¹) is 1059.2, 1057.0, 1055.8, 1053.7, 1052.5, and $\omega_e x_e$ (CM⁻¹) is 4.8, 4.7, 4.7, 4.5, 4.4, for ⁹²MoN, ⁹⁴MoN, ⁹⁶MoN, ⁹⁸MoN, ¹⁰⁰MoN, resp.

(A⁴Π-X⁴Σ)

dia. 5990-
6330Å

C.A. 1994, 121, N20

Humpage Mo

1995

Jung Kook Young.

Diss. Abstr. Int. B 1995,
55(12), 5357.

(see Humpage Ti; III)

MoN

40666, OF 37898

1995

123: 211858g Laser induced fluorescence spectrum of the $A^4\Pi-X^4\Sigma^-$ (0,0) band of MoN. Sze, N. S-K.; Cheung, A. S-C. (Dep. Chem., Univ. Hong Kong, Hong Kong, Hong Kong). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 173(1), 194-204 (Eng). The $A^4\Pi-X^4\Sigma^-$ (0,0) band of MoN between 5990 and 6350 Å has been studied using laser induced fluorescence spectroscopy. In addn. to observing the stronger $\Delta\Sigma = 0$ transitions, the weaker $\Delta\Sigma = \pm 1$ transitions have also been recorded and analyzed. The ^{96}Mo and ^{98}Mo nuclear hyperfine structures ($I = 5/2$) give considerable broadening to the F_1 and F_4 branches with six hyperfine components of a rotational line spread more than 0.1 cm^{-1} . The hyperfine linewidths vary with J in the manner expected for spin uncoupling from case (a₁) to case (b₁) in a high multiplicity state. A merged least-squares fit of the present data and the earlier work yielded improved mol. consts. of both the $\alpha^4\Pi$ and $X^4\Sigma^-$ states of the seven isotopic mols.

($A^4\Pi-X^4\Sigma^-$)

C.A. 1995, 123, N 16

MoN

40666, OM 37 898 1995
11B1247. Спектр лазерной флуоресценции
полосы (0, 0) перехода $A^4\Pi-X^4\Sigma^-$ MoN. Laser
induced fluorescence spectrum of the $A^4\Pi-X^4\Sigma^-$ (0, 0)
band of MoN / Sze N. S.-K., Cheung A. S.-C. // J. Mol.
Spectrosc.— 1995.— 173, № 1.— С. 194—204.— Англ.

С разрешением, ограниченным доплеровским ушире-
нием, измерена структура полосы 0—0 перехода $A^4\Pi-X^4\Sigma^-$
в спектре лазерной флуоресценции MoN в обла-
сти 593—635 нм. В дополнение к ранее наблюдавшимся
подпереходам с $\Delta\Sigma=0$ наблюдали малоинтенсивные под-
переходы с $\Delta\Sigma=\pm 1$. Рассчитаны и приведены значения
молекулярных постоянных B , D , λ , γ , λ_D и γ_D в состо-
янии $X^4\Sigma^-$ и T_Ω ; B , D , γ , A_D , $(o+p+q)$, $(p+2q)$, q , λ_D
в состоянии $A^4\Pi$ семи изотопных модификаций молекулы
MoN($^{92,94-98,100}\text{Mo}$). В. М. Ковба

М.А.

X. 1997, N 121

MoNa

(Dm: 39086)

1997

cmp-ra,
meorim.
pavem

Pekka Pyrkko and
Toomas Tamm,

J. Phys - Chem., 1997,
A101, 8107 - 8114

NMoO

[05.40129]

1999

131: 51262t Reactions of Laser-Ablated Molybdenum and Tungsten Atoms with Nitric Oxide. Infrared Spectra of the MN, NMO, and $M-\eta^1-(NO)_x$ ($x = 1, 2, 3, 4$) Molecules and $(NO)_2^+$ and $(NO)_2^-$ Ions in Solid Argon. Andrews, Lester; Zhou, Mingfei (Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, VA 22901 USA). *J. Phys. Chem. A*: 1999, 103(21), 4167-4173 (Eng), American Chemical Society. Laser-ablated Mo and W atoms react with NO to give primarily the nitride-oxide insertion products NMoO and NWO, but weak MoN and WN absorptions are also obsd. The NMoO and NWO 'mols. are identified from isotopic substitution (^{96}Mo , ^{15}N , ^{18}O) and d. functional theory (DFT) calcs. The M-N and M-O stretching frequencies of the

(UK chem, Di).

□ (f3)

NWO (UK chem, Di)

Mo(NO)₄, Cr(NO)₄

(UK chem, chem)

C.A., 1999, 131, N4

$^2A'$ state NMoO and NWO mols. are predicted by DFT (scale factors 0.936 ± 0.004 and 0.966 ± 0.005 , resp.), but more importantly, the isotopic shifts (and normal modes) are well-described by DFT isotopic frequencies. The higher energy MoNO isomer is obsd., but WNO and the $M-\eta^2-$ NO complexes are not found. The $M-(\eta^1-\text{NO})_x$ ($x = 2, 3, 4$) complexes are obsd.: mixed isotopic splittings indicate that $\text{Mo}(\text{NO})_4$ is tetrahedral, like $\text{Cr}(\text{NO})_4$, but the spectra show that $\text{W}(\text{NO})_4$ is distorted to C_{2v} symmetry. A weak 3643.5 cm^{-1} combination band and strong 1589.3 cm^{-1} fundamental for $(\text{NO})_2^+$ and the strong fundamentals for cis- and trans- $(\text{NO})_2^-$ were obsd.

$\text{Mo}(\text{NO})_4$

Ok. 40129

1999

Andrews, Lester; et al.,

J. Phys. Chem. A 1999,
103(21), 4167-73

UK chem,
снрхм.

(cell. ● NMoO; III)

F: MoNn

P: 3

MoN, MoN₂

Om. 40181

1999

131:108391 Reactions of Laser-Ablated Mo and W Atoms with Dinitrogen: Infrared Spectra of Metal Nitrides, Dinitrides, and Complexes in Solid Argon and Nitrogen.

Andrews, Lester; Souter, Philip F.; Bare, William D.; Liang, Binyong (Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, VA 22901, USA).

J. Phys. Chem. A, 103(24), 4649-4658 (English) 1999

Laser-ablated Mo and W atoms react with N₂ in excess N and Ar to form the metal nitrides, MN, and ligated complexes, (NN)xMN, the metal dinitrides, NMN, and ligated complexes, (NN)xMN₂, and several complexes M(NN)x leading up to the octahedral species with x = 6.

From the resoln. of natural abundance Mo isotopes and ¹⁵N substitution, the open, bent NMo mol. valence angle is 106 .+- . 3.degree.. The dinitride mols. are formed both by direct insertion of metastable metal atoms into dinitrogen and by the addn. of at. N to the mononitride mol.

C.A. 1999, 131

MoN
NMoN

[Om. 40181]

1999

Lester Andrews⁺ et al.,

4²,
(_{7i})

J. Phys. Chem. A1999, 103,
N24, 4649 - 4658.

F: MoN2

P: 3

05-40144

1999

132:185600

Computational study of the geometric and electronic structures MN₂ (M = Mo or U). Brown, Katherine L.; Kaltsoyannis, Nikolas Department of Chemistry, University College London London WC1H 0AJ, UK J. Chem. Soc., Dalton Trans., (24), 4425-4430 (English) 1999

The geometric and electronic structures of singlet, triplet, quintet, an septet MN₂ (M = Mo or U) were calcd. using quasi-relativistic, non-local functional theory. The distribution of the MoN₂ structures over the spin agrees well with previous theor. data, as do the relative energies and vibrational wavenumbers of the min. Six true min. energy stationary poin structures were located. Whereas

C. A. Lood, 132

all of the MoN₂ structures are less stable than the Mo + N₂ asymptote, all of the UN₂ min. are stable with respect to dissociation to metal + N₂. Singlet linear NUN is found to be the most stable structure at the scalar relativistic level, the inclusion of spin-orbit coupling does not significantly affect the NUN energy with respect to the U + N₂ asymptote. The bonding in all of the UN₂ structures was analyzed. The U interaction in the quintet and septet narrow angle side-on triangular geometry is a mixture of U 5f N₂ π δ and π back-bonding, with the latter component being much the more significant. U forward N₂ π back-bonding also found to be the principal U-N₂ interaction in triplet and septet linear end-on UN₂. The U-N Mulliken overlap populations are largest for the wide triangular and linear NUN structures, consistent with the much shorter U- lengths in these geometries in comparison with the narrow angle side-on a linear end-on min. The agreement between the calculated and experimental vibration wavenumbers for linear NUN is very good, and is superior to previous theoretical studies. The relevance of the present work to previous computational investigations of the U-N₂-U bonding in $[(\text{NH}_2)_3(\text{NH}_3)\text{U}]_2(\mu-\eta^2:\eta^2)$ is discussed.

OT. 39826

1999

F: MoN

P: 3

132:143629 Fine and hyperfine interactions in
CrN and MoN. Namiki, Kei-ic C.; Steimle, Timothy
C. Department of Chemistry and Biochemistry,
Arizona State University Tempe, AZ 85287-1604,
USA J. Chem. Phys., 111(14), 6385-6395 (English)
1999 Pure rotational transitions of $52\text{Cr}14\text{N}$ and
 $98\text{Mo}14\text{N}$ radicals in their X4.SIGMA.- state were
recorded using pump/probe microwave-optical double
resonance from which the hyperfine parameters of

C. A. 2000, 132

^{14}N ($I = 1$) were precise detd. The (0,0) A4.PI.-X4.SIGMA. band system of ^{53}CrN was recorded from which the hyperfine parameters of ^{53}Cr ($I = 3/2$) were detd. The newly de hyperfine interactions for ^{53}Cr and ^{14}N in CrN and ^{14}N in MoN and the previously detd. hyperfine interactions for other early transition metal mononitrides were analyzed using a simple, single configurational model. improved set of fine structure parameters for CrN and MoN are discussed i terms of possible electronic state distributions.

F: MoN

P: 3

Om 40668

1999

130:257513 All electron ab initio investigations of the electronic states the MoN molecule.

Shim, I.; Gingerich, K. A. (Dep. Appl. Chem., DTU 375, Technical Univ. of Denmark, Lyngby DK2800, Den.). THEOCHEM, 460, 123-136 (English) 1999

The low lying electronic states of the mol. MoN were investigated by performing all electron ab initio multi-configuration self-consistent-fie (CASSCF) calcns.

The relativistic corrections for the one electron Darwi contact term and the relativistic mass-velocity correction were detd. in perturbation calcns. The electronic ground state was confirmed to be 4.s The chem. bond of MoN has a triple-bond character because of the approx. occupied

delocalized bonding .pi. and .sigma. orbitals.

The spectroscopic consts. for the ground state and ten excited states were derived. The ex doublet states 2.sum.-, 2.GAMMA., 2.DELTA., and 2.sum.+ were found to be lying than the 4.PI. state that was investigated exptl. Elaborate multi- configuration CI (MRCI) calcns. were carried out for the states 4.sum.- a 4.PI. using various basis sets. The spectroscopic consts. for the 4.sum. ground state and 4.PI. state were detd.: $r_e = 1.636$, $\omega_e = 1109$ cm⁻¹; r_A and $\omega_e = 941$ cm⁻¹, resp. The values for the ground state are in ex agreement with available exptl. data. The MoN mol. is polar with a charge transfer from Mo to N. The dipole moment was calcd. to be 2.11 D in the state and 4.60 D in the 4.PI. state. These values agree well with the re exptl. values detd. from mol. Stark spectroscopic measurements. The diss energy, D_e , is 5.17 eV; D_0 is 5.10 eV.

MoN

2000

+

 $(A^4\Pi_2 - X^4\Sigma^-)$

134: 78102q High-resolution spectroscopy of the $A^4\Pi_r - X^4\Sigma^-$ band system of MoN. Andersson, Nils; Minaev, Boris (Department of Physics, Stockholm University, S-11385 Stockholm, Swed.). *Phys. Scr.* 2000, 62(5), 417-424 (Eng), Royal Swedish Academy of Sciences. The emission spectrum of MoN between 13,200 and 18,400 cm^{-1} was recorded by a microwave discharge and a Fourier Transform spectrophotometer (FTS). The transition $A^4\Pi_r - X^4\Sigma^-$ was rotationally analyzed. Spin-orbit coupling consts. were detd. for the $A^4\Pi_r$ state. A no. of states were studied by the multiconfiguration SCF (MCSCF) method with linear response (LR) technique and with account of spin-orbit coupling (SOC) as a perturbation. Besides that the multireference CI (MRCI) + SOC matrix was diagonalized. Deviation from an equidistant splitting of the $A^4\Pi_r$ state and the large spin-sublevel splitting of the ground state were qual. explained as due to 2nd-order SOC.

C. A. 2001, 134, №6.

3506

OT-40 922,

Om 40667

2000

F: MoN

P: 3

133:111689 Hyperfine structure in the
A4.PI..CHI.4.SIGMA.- (0,0) band of MoN. Jiang, He;
Chan, C. M.-T.; Cheung, A. S.-C. Dep. Chem., Univ.
Hong Kong Hong Kong, Hong Kong J. Mol.
Spectrosc., 202(1), 144-154 (English) 2000. The (0,0)
band of the A4.PI.-.CHI.4.SIGMA.- transition of MoN,
between 590 and 635 nm, was studied using the sub-
Doppler technique of intermodulated laser-induced
fluorescence spectroscopy. Spectra taken at a resoln.
of ~60 MHz showed magnetic moment of the 4295Mo and
4297Mo nuclei with nuclear spin $I = 5/2$. The hyperfine

structures of the ground state vary with J in the manner expected for spin uncoupling from case (a.beta.) to case (b.beta.J). This band is notable for its complex appearance due to a combination of the high-spin multiplicity transition and the presence of seven isotopic species. Least-squares fits of the obsd. hyperfine line positions have yielded comprehensive sets of rotational, spin, and hyperfine parameters for the A4.PI. and .CHI.4.SIGMA.- states of ^{95}MoN and ^{97}MoN . The hyperfine parameters are interpreted and give information about the electron distribution in the mol. Improved mol. consts. of other isotopomers with zero Mo nuclear spin are also reported.