

УДК 535.338+621.373.826

ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПОСТОЯННЫЕ МОНОНИТРИДА МОЛИБДЕНА (MoN)

Ю.Я. Кузяков, Е.Н. Москвитина

(кафедра лазерной химии; e-mail: kuzyakov@laser.chem.msu.ru)

Рассмотрены электронные спектры и строение мононитрида молибдена. Внутривибрационным лазерным методом в области 550–750 нм получен электронно-колебательно-вращательный спектр мононитрида молибдена. Проведен анализ спектра и рассчитаны молекулярные постоянные основного ($X^4\Sigma$) и возбужденного ($A^4\Pi$) состояний. На основании полученных экспериментальных данных и критического анализа всей информации об исследованиях спектра MoN рекомендован набор наиболее достоверных значений молекулярных постоянных.

Электронные спектры являются важнейшим источником информации о фундаментальных постоянных. Однако накопление экспериментальных данных для молекул, в состав которых входят атомы переходных металлов, происходит относительно медленными темпами вследствие трудностей, связанных как с получением электронных спектров, так и с их анализом. Получение двухатомных нитридов переходных элементов в газовой фазе, в количествах, достаточных для регистрации их спектров, является сложной экспериментальной задачей. Поскольку твердые нитриды представляют собой соединения с высокими температурами плавления и кипения, то для получения двухатомных молекул обычно используют нетермические источники – различные типы разрядов в парах галогенидов металлов или лазерное испарение металлов в атмосфере азота. Кроме того, наличие неспаренных d -электронов в атомах переходных металлов обуславливает большое число близлежащих электронных состояний с высокой мультиплетностью, спиновые компоненты которых взаимодействуют между собой, вызывая многочисленные возмущения колебательных и вращательных уровней энергии. Эти обстоятельства затрудняют интерпретацию наблюдаемых спектров и делают проблематичным проведение прецизионных квантово-механических расчетов. В связи с перечисленными выше обстоятельствами спектры нитридов переходных металлов исследованы недостаточно полно. В настоящей работе представлены результаты изучения электронного спектра молекулы MoN, выполненные как авторами настоящей статьи, так и другими исследователями, и рекомендован наиболее достоверный набор молекулярных постоянных, характеризующих строение этой молекулы.

В 1965 г. на основании изучения изотопных сдвигов по ^{15}N было установлено, что спектр испускания в области 599–630 нм, долгое время относимый к молекуле MoO [2–4], принадлежит молекуле нитрида молибдена (предположительный состав Mo x N) [1]. Спектр поглощения нитрида молибдена в плазме импульсного разряда в смеси паров MoCl $_5$ с азотом впервые был получен авторами настоящей работы в 1977 г. [5]. В области 610–630 нм было зарегистрировано 26 полос с красным оттенением, образующих три интенсивные группы с интервалами между ними 400 и 310 см $^{-1}$. Использование изотопов азота в разных соотношениях ($^{14}\text{N}_2$: $^{15}\text{N}_2$) позволило установить, что носителем спектра является молекула, содержащая один атом азота.

В 1979 г. при использовании разряда в полой катодной трубке из молибдена в атмосфере азота были получены спектры молекул MoN, изолированные в матрицах из Ne, Ar и Kr при 4.2 и 13 К в синей (420–460 нм) и красной (570–630 нм) спектральных областях [6]. По аналогии со спектрами изовалентных молекул VO [7] и NbO [8] полосы в области 420–460 нм были отнесены к переходу $B^4\Sigma-X^4\Sigma$, а полосы в области 570–630 нм – к переходу $A^4\Pi-X^4\Sigma$. Спектры ЭПР молекул MoN, изолированных в Ne-, Ar- и Kr-матрицах [9], подтвердили, что основным электронным состоянием MoN является $X^4\Sigma$ (величина мультиплетного расщепления между компонентами $X^4\Sigma_{1/2}$ и $X^4\Sigma_{3/2}$ составляет ~ 86 см $^{-1}$).

Анализ колебательной структуры электронного спектра молекулы MoN

Впервые значения колебательных частот для компонент возбужденного состояния $A^4\Pi_{3/2}$ и $A^4\Pi_{1/2}$ (971 и 954 см $^{-1}$ соответственно) были получены в спек-

трах матричной изоляции [6]. Колебательная частота основного состояния $X^4\Sigma_{1/2}^-$ $Mo^{14}N$ (1040 см^{-1}) была определена по ИК-спектру. Точность определения волновых чисел полос в ультрафиолетовой и видимой областях не превышала $\pm 10\text{ см}^{-1}$, а в ИК-области $\pm 0,5\text{ см}^{-1}$.

Исследование колебательной структуры перехода $A^4\Pi_{\Omega}^- - X^4\Sigma_{\Omega}^-$ моонитрида молибдена в газовой фазе, начатое в [10], продолжено в настоящей работе. Для получения полос прогрессий с $\Delta v \neq 0$ использовали высокочувствительный метод внутривибрационной лазерной спектроскопии, разработанный для получения молекулярных многолинейчатых спектров в широком спектральном диапазоне в видимой области и позволяющий регистрировать полосы с коэффициентами поглощения 10^{-6} см^{-1} с высоким разрешением. Длина поглощающего слоя в наших экспериментах достигала ~ 1000 метров. Подробное описание установки приведено в [11]. Образование молекул MoN происходило в плазме высоковольтного импульсного разряда через смесь паров изотопообогащенного ($\sim 98\%$) $^{98}MoCl_5$ и $^{14}N_2$ (или $^{15}N_2$). Спектры были получены на спектрографе с дифракционной решеткой 75 шт/мм, работающей в 24–28 порядках. Обратная линейная дисперсия составляла 0,1 нм/мм. Точность определения положения изолированных линий составляла $\pm 0,02\text{ см}^{-1}$. В области 550–750 нм наблюдали 69 кантов полос (из них 55 неизвестных ранее). Отнесение новых полос к спектру молекулы MoN было выполнено на основании изучения изотопных сдвигов по азоту $^{15}N_2$ и подтверждено последующим анализом. Три наиболее интенсивные группы полос в области 590–610 нм отнесены к электронному переходу $A^4\Pi_{\Omega}^- - X^4\Sigma_{\Omega}^-$. Особенностью спектра моонитрида молибдена является нерегулярность расположения Ω -компонент $^4\Pi$ -состояния. Расстояние между компонентами $^4\Pi_{1/2}^- - ^4\Pi_{-1/2}^-$ составляет $64,4\text{ см}^{-1}$, в то время как эти расстояния между компонентами $^4\Pi_{3/2}^- - ^4\Pi_{1/2}^-$ и $^4\Pi_{5/2}^- - ^4\Pi_{3/2}^-$ равны соответственно 319,5 и $435,8\text{ см}^{-1}$. При анализе перехода $A^4\Pi_{\Omega}^- - X^4\Sigma_{\Omega}^-$ мы исходили из предположения, что комбинирующие электронные состояния относятся к промежуточному ($a-c$) случаю связи по Гунду. В этом случае из правил отбора $\Delta\Sigma = 0$, $\Delta\Omega = 0$, ± 1 и $\Delta\Lambda = 0$, ± 1 выполняется только одно — $\Delta\Omega = 0$, ± 1 . Это приводит к появлению дополнительных компонент мультиплетных переходов в спектрах. Мы впервые наблюдали переходы между компонентами $A^4\Pi_{5/2}^- - X^4\Sigma_{1/2}^-$ (596,0 нм), $A^4\Pi_{3/2}^- - X^4\Sigma_{3/2}^-$ (615,5 нм), $A^4\Pi_{1/2}^- - X^4\Sigma_{3/2}^-$

(627,5 нм) и $A^4\Pi_{-1/2}^- - X^4\Sigma_{1/2}^-$ (627,0 нм), запрещенные строгими правилами отбора. Наиболее простой является коротковолновая подсистема $A^4\Pi_{5/2}^- - X^4\Sigma_{1/2}^-$. Сложная система в красной области включает в себя четыре Ω -компоненты ($^4\Pi_{1/2}^- - X^4\Sigma_{1/2}^-$, $^4\Pi_{-1/2}^- - X^4\Sigma_{1/2}^-$, $^4\Pi_{3/2}^- - X^4\Sigma_{3/2}^-$, $^4\Pi_{1/2}^- - X^4\Sigma_{3/2}^-$), сильно перекрывающиеся между собой. Для всех подсистем перехода $A^4\Pi_{\Omega}^- - X^4\Sigma_{\Omega}^-$ были получены полосы прогрессий с $\Delta v = 0$, ± 1 ($v', v'' = 0-2$), а изотопические сдвиги в полосах, принадлежащих молекулам $^{98}Mo^{14}N$ и $^{98}Mo^{15}N$, позволили провести анализ колебательной структуры и получить значения колебательных постоянных комбинирующих электронных состояний (для молекулы ^{98}MoN : $\omega'_e = 1053,7 \pm 0,5\text{ см}^{-1}$ и $\omega''_e x''_e = 4,59 \pm 0,2\text{ см}^{-1}$, $\omega'_e = 978,3 \pm 0,5\text{ см}^{-1}$ и $\omega'_e x'_e = 1,37 \pm 0,2\text{ см}^{-1}$. Значения ω''_e и ω'_e для разных компонент состояний $X^4\Sigma_{\Omega}^-$ и $A^4\Pi_{\Omega}^-$ незначительно отличаются между собой ($1-3\text{ см}^{-1}$) за исключением компоненты $A^4\Pi_{5/2}^-$, для которой значение $\Delta G_{1/2}$ равно $996,2 \pm 0,5\text{ см}^{-1}$. Приведенные выше значения колебательных постоянных относятся к компонентам $X^4\Sigma_{1/2}^-$ и $A^4\Pi_{3/2}^-$.

Колебательная структура электронного спектра MoN была изучена также в работах [12, 13], авторы которых исследовали систему $A^4\Pi_{\Omega}^- - X^4\Sigma_{\Omega}^-$ в области 595–635 нм методом лазерно-индуцированной флуоресценции. В работе [12] спектр MoN был получен в эмиссии плазмы, образующейся при лазерной абляции молибдена в азоте. Полосы, относящиеся к $^4\Pi - ^4\Sigma$ переходу были получены на спектрографе с малой разрешающей силой и дисперсией, поэтому значения колебательных постоянных, полученных в [12], имеют невысокую точность, так как положения кантов полос измерены с точностью хуже, чем $0,5\text{ см}^{-1}$. В работе [13] молекулы MoN возбуждались в микроволновом разряде в парах $MoCl_5$ с азотом. Были получены полосы (0–0), (0–1) и (0–2) перехода $A^4\Pi - X^4\Sigma$ MoN в области 599–633 нм для пяти изотопомеров $^{92}Mo^{14}N$, $^{94}Mo^{14}N$, $^{96}Mo^{14}N$, $^{98}Mo^{14}N$, $^{100}Mo^{14}N$ и рассчитаны колебательные постоянные для основного состояния. Значения ω''_e и $\omega''_e x''_e$ для молекулы $^{98}Mo^{14}N$ совпадают с полученными нами.

Анализ вращательной структуры спектра MoN

Вращательный анализ 0–0 полос перехода $A^4\Pi(a) - X^4\Sigma^-(a)$ молекулы MoN впервые был выполнен в [14]. Структура квартетного перехода очень сложна, так как природный молибден состоит из семи изотопов с массовыми числами: 92 (15,86%), 94 (9,12%), 95 (15,70%), 96 (16,50%), 97 (9,45%),

98 (23,75%), 100 (9,62%) и полосы, принадлежащие изотопомерам, сильно перекрываются, затрудняя выделение ветвей и их идентификацию. Поэтому вращательный анализ был проведен для молекулы ^{94}MoN . Молекулы монокрида молибдена возбуждались в микроволновом разряде в парах изотопобогащенного (~85%) $^{94}\text{MoCl}_5$ с активным азотом ($^{14}\text{N}_2$ или $^{15}\text{N}_2$) и гелием. Для получения спектров использовали спектрограф с обратной линейной дисперсией ~3 А/см. Точность определения положений линий вращательной структуры $\pm 0,003 \text{ см}^{-1}$. Вращательный анализ был проведен для четырех наиболее интенсивных 0–0-полос: $A^4\Pi_{5/2}-X^4\Sigma_{3/2}^-$ (599,6 нм), $A^4\Pi_{3/2}-X^4\Sigma_{1/2}^-$ (612,3 нм), $A^4\Pi_{1/2}-X^4\Sigma_{1/2}^-$ (624,5 нм) и $A^4\Pi_{-1/2}-X^4\Sigma_{3/2}^-$ (630,5 нм). В каждой полосе было выделено по 6 ветвей (Q_{ef} , Q_{fe} , P_{ee} , P_{ff} , R_{ee} , R_{ff}), наблюдались вращательные линии со значениями квантового числа $J \leq 60$. На первоначальном этапе расчета отдельные подполосы перехода $A^4\Pi_{\Omega}-X^4\Sigma_{\Omega}^-$ анализировали с помощью комбинационных соотношений, молекулярные постоянные рассчитывали для каждого индивидуального подсостояния $^4\Pi_{\Omega}$ и $^4\Sigma_{\Omega}^-$. На конечном этапе вращательные постоянные состояний $^4\Pi$ и $X^4\Sigma^-$ рассчитывали с использованием эффективного Гамильтониана, включающего частоты линий всех четырех подполос мультиплетных компонент основного и возбужденного электронных состояний. Экспериментальные и рассчитанные частоты вращательных линий изменяются в пределах от ~0,01 до 0,6 см^{-1} . Значения вращательных постоянных, полученных в работе [14] для основного и возбужденного электронных состояний молекулы ^{94}MoN , соответственно равны $B' = 0,51679(45) \text{ см}^{-1}$, $B'' = 0,50380(11) \text{ см}^{-1}$. Анализ вращательной структуры показал, что спин-орбитальное взаимодействие второго порядка A_D аномально большое и составляет величину $4,0295 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. В работе [15] был получен спектр лазерно-индуцированной флуоресценции MoN в сверхзвуковом молекулярном пучке в области 596–633 нм. Была проанализирована система четырех 0–0-полос: $A^4\Pi_{5/2}-X^4\Sigma_{3/2}^-$, $A^4\Pi_{3/2}-X^4\Sigma_{1/2}^-$, $A^4\Pi_{1/2}-X^4\Sigma_{1/2}^-$, $A^4\Pi_{-1/2}-X^4\Sigma_{3/2}^-$ для изотопных модификаций ^{92}MoN , ^{94}MoN , ^{96}MoN , ^{98}MoN и ^{100}MoN , но из-за низкой температуры сверхзвукового пучка были зарегистрированы только линии с низкими значениями J ($J \leq 15,5$), и молекулярные постоянные, соответствующие центробежному искажению, не были определены. Вращательные постоянные $B' = 0,50373(17) \text{ см}^{-1}$ и $B'' = 0,51697(17) \text{ см}^{-1}$, полученные для молекулы ^{94}MoN ,

находятся в хорошем согласии со значениями, приведенными в работе [14], однако постоянные спин-орбитального взаимодействия второго порядка (A_D , γ и ρ) существенно различаются.

В работе [16] в спектре лазерно-индуцированной флуоресценции в дополнение к ранее наблюдаемым [14, 15] сильным переходам с $\Delta\Sigma = 0$ были получены и более слабые переходы с $\Delta\Sigma = \pm 1$: $A^4\Pi_{5/2}-X^4\Sigma_{1/2}^-$ (596,0 нм), $A^4\Pi_{3/2}-X^4\Sigma_{3/2}^-$ (615,5 нм), $A^4\Pi_{1/2}-X^4\Sigma_{3/2}^-$ (627,5 нм), $A^4\Pi_{-1/2}-X^4\Sigma_{1/2}^-$ (627,0 нм), для которых был проведен вращательный анализ. Однако для переходов с $\Delta\Sigma = \pm 1$ были отнесены только наименее перекрытые и сильные линии. Вращательный анализ 0–0-полос перехода $A^4\Pi_{(a)}-X^4\Sigma_{(a)}^-$ был проведен для всех семи изотопомеров (^{92}MoN , ^{94}MoN , ^{95}MoN , ^{96}MoN , ^{97}MoN , ^{98}MoN , ^{100}MoN). В расчет методом наименьших квадратов были включены линии переходов с $\Delta\Sigma = 0$, $\Delta\Sigma = \pm 1$, а также вращательные линии переходов, полученных в экспериментах со сверхзвуковым молекулярным пучком [15]. В работе [16] наблюдался систематический сдвиг от 0,03 до 0,08 см^{-1} в положениях линий, приведенных в работе [14], который мог возникнуть, по-видимому, из-за разницы в калибровке, так как в [16] спектры калибровались индивидуально по линиям I_2 с интервалами в 1 см^{-1} . Впервые были экспериментально определены молекулярные постоянные для ^{95}MoN и ^{97}MoN . Молекулярные параметры для остальных пяти изотопомеров находятся в согласии с данными, полученными в [15]. Поскольку в работе [16] были получены вращательные линии с высокими значениями J , центробежные поправки для разных параметров, а также зависящие от J параметры Δ -удвоения измерены с большей точностью. В работе [17] были исследованы тонкая и сверхтонкая структуры четырех 0–0-подполос перехода $A^4\Pi-X^4\Sigma^-$ с использованием субдоплеровской лазерно-индуцированной флуоресценции. Вращательный анализ спектров изотопомеров ^{92}MoN , ^{94}MoN , ^{96}MoN , ^{98}MoN и ^{100}MoN был проведен с учетом поправок на центробежное искажение D и поправок на центробежное искажение к параметрам Λ -удвоения — D_{o+p+q} , D_{p+2q} и D_q . Среднеквадратичные ошибки отклонения рассчитанных положений вращательных линий изотопомеров с $I = 0$ от экспериментально измеренных значений составляют приблизительно $\pm 0,003 \text{ см}^{-1}$. Анализ сверхтонкой структуры спектров молекул ^{95}MoN и ^{97}MoN показал, что состояние $A^4\Pi$ сильно возмущено, возможно, состоянием $^2\Pi$, имеющим ту же

Состояние $X^4\Sigma$	Молекулярные постоянные (см^{-1})	Состояние $A^4?$	Молекулярные постоянные (см^{-1})	Литература
$T_{1/2}$	0	$T_{3/2}$	16717,840(1)	[5, 8, 9, *]
$T_{3/2}$	84,07	$T_{3/2}$	16283,178(2)	[5, 8, 9, *]
–	–	$T_{1/2}$	15963,473(3)	[5, 8, 9, *]
λ	21,4601(41)	$T_{-1/2}$	15898,192(13)	[8, 9, *]
B	0,514368(14)	B	0,501456(22)	[8, 9, *]
10^7D	5,01(10)	10^7D	5,27(9)	[8, 9, *]
$10^2\gamma$	1,11714(37)	$10^2\gamma$	7,90(39)	[8, 9]
–	–	10^4A_D	3,31(9)	[8, 9]
$10^5\lambda_D$	-1,42(44)	$10^5\lambda_D$	5,74(37)	[8, 9]
ω_e	1053,7(0,4)	ω_e	978,3(0,5)	[10, 13, *]
$\omega_e X_e$	4,5(0,2)	$\omega_e X_e$	3,8(0,2)	[13, *]
$R_e E$	1,63595	$r_e E$	1,65688	–
Электронная конфигурация	$1\sigma^2 2\sigma^2 1\pi^4 1\delta^2 3\sigma^1$	–	$1\sigma^2 2\sigma^2 1\pi^4 1\sigma^2 2\pi^1$	–

Примечания. В скобках приведены ошибки рассчитанных значений; * – данные, полученные авторами настоящей статьи.

электронную конфигурацию, что и $A^4\Pi$. Для состояний $A^4\Pi$ и $X^4\Sigma^-$ молекул ^{95}MoN и ^{97}MoN вращательный анализ позволил получить набор из 30 вращательных, спиновых и сверхтонких параметров. Поскольку в спектрах MoN , полученных в [10], наблюдалось значительно большее число кантов полос, чем в работах других исследователей [14–16] (в том числе интенсивные полосы с $\Delta\Sigma = \pm 1$, запрещенные правилами отбора), был проведен вращательный анализ подполос $A^4\Pi_{5/2}^- - X^4\Sigma_{-1/2}^-$ ($16884,03 \text{ см}^{-1}$), $A^4\Pi_{3/2}^- - X^4\Sigma_{-3/2}^-$ ($16258,59 \text{ см}^{-1}$), $A^4\Pi_{1/2}^- - X^4\Sigma_{-3/2}^-$ ($16142,72 \text{ см}^{-1}$), $A^4\Pi_{-1/2}^- - X^4\Sigma_{-1/2}^-$ ($15957,61 \text{ см}^{-1}$). В полосах наблюдали линии вращательной структуры с $J \leq 60$. Расчет проводили с учетом постоянных спин-спиновых и спин-вращательного взаимодействий. Полученные нами расчетные значения положения кантов ветвей полос (R_{ee} , R_{ff} ; P_{ee} , P_{ff} ; Q_{ef} , Q_{fe}) указанных выше переходов находятся в очень хорошем согласии с экспериментально наблюдаемыми, что дополнительно подтвердило правильность сделанного нами отнесения всех наблюдаемых полос. Таким образом, в настоящее время наиболее достоверными значениями колебательных постоянных основного $X^4\Sigma^-$ и возбужденного $A^4\Pi$

состояний можно считать величины, полученные в нашей работе [10] и в работе [13]. Значения вращательных постоянных для этих состояний определены с высокой точностью в работах [15–17].

Энергия диссоциации

Значение $D(\text{MoN}, ^4\Sigma)$, полученное в результате линейной экстраполяции колебательных уровней энергии основного состояния молекулы моонитрида молибдена, составляет 7,6 эВ (176,2 ккал/моль). Поскольку это значение завышено, рассчитанную величину энергии диссоциации уменьшают на ~20% [18]. Таким образом, для основного состояния значение $D''(\text{MoN}, ^4\Sigma)$ составляет 6,08 эВ (140 ккал/моль). Значение энергии диссоциации MoN было оценено в работе [19] по эмпирическому правилу: отношение теплоты атомизации твердого MeN к энергии диссоциации данного нитрида приблизительно постоянно

$$\alpha = \Delta H_{298}^0(\text{ат MeN})/D_{298}^0(\text{MeN}) \approx 1,24.$$

Величину α определяли как среднее по экспериментально полученным энергиям диссоциации для трех молекул (UN , ThN , ZrN). Оцененная таким образом энергия диссоциации MoN составляет

5,08 эВ (118 ккал/моль). При оценке энергии диссоциации MoN использовали инвариантные соотношения для молекулярных постоянных двухатомных молекул, приведенные в работе [20]. Величина энергии диссоциации основного состояния оказалась равной 5,6 эВ. По-видимому, наиболее вероятное значение энергии диссоциации основного состояния находится в пределах 6,1–5,1 эВ.

Критический анализ всех экспериментальных данных включал в себя такие характеристики исследо-

ваний, как: а) методы получения спектров, б) использование спектральных приборов с высокой разрешающей силой в широком интервале длин волн, в) точность измерения положений индивидуальных спектральных линий, г) выбор модели строения, д) методы расчета положений уровней энергии и молекулярных постоянных. На основании выбранных критериев мы рекомендуем в качестве наиболее достоверных молекулярных постоянных мононитрида молибдена ^{98}MoN значения, приведенные в таблице.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Howard J.C., Conway J.G. // J. Chem. Phys. 1965. **43**. P. 3055.
2. Piccardi G. // Atti Acad. Nazl. Lincei. 1933. **17**. P. 654.
3. Swaminathan T.M., Krishnamurti S.J. // Current Sci. (India). 1954. **23**. P. 258.
4. Gatterer A., Junkes J., Salpeter E.W. // Molecular Spectra of Metallic Oxides. Vatican Citi, 1957.
5. Кабанкова Н.Н., Москвитина Е.Н., Кузяков Ю.Я. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1977. **18**. С. 362.
6. Bates J.K., Gruen D.M. // J. Mol. Spectrosc. 1979. **78**. P. 284
7. Weltner W. // Adv. High Temp.Chem. 1969. **2**. P. 85.
8. Brom J.M., Durham C.H., Weltner W. // J. Chem. Phys. 1974. **61**. P. 970.
9. Knight L.B., Steadman J. // J. Chem. Phys. 1982. **76**. P. 3378.
10. Pazyuk E.A., Moskvitina E.N., Kuzyakov Y.Y. // Spectrosc. Lett. 1988. **21**. P.447.
11. Kuzyakov Yu.Ya., Moskvitina E.N. // Intracavity spectroscopy of simple molecules, SPIE. The International Society of Optical Engeniering. 1998. **3342**. P. 148.
12. Березин А.Б., Дмитрук С.А., Катаев Д.И. // Оптика и спектроскопия. 1990. **68**. С. 310.
13. Sze N.S.-K., Cheung A.S.-C. // J. Quant. Speectosc. Radiat. Transfer. 1994. **52**. P. 145.
14. Carlson R.C., Bates J.K., Dann T.M. // J. Mol. Spectrosc. 1985. **110**. P. 215.
15. Jung K.J., Fletcher D.A., Steimle T.C. // J. Mol. Spectrosc. 1994. **165**. P. 448.
16. Sze N.S.-K., Cheung A.S.-C. // J. Mol. Spectrosc. 1995. **173**. P. 194.
17. Jiang He, Chan C.M.-T., Cheung A.S.-C. // J. Mol. Spectrosc. 2000. **202**. P. 144
18. Гейдон А. Энергия диссоциации и спектры двухатомных молекул. М., 1949. С. 302.
19. Gingerich K.A. // J. Chem. Phys. 1968. **49**. P.19.
20. Тюлин В.И., Грановский Ю.В., Матвеев В.К. // ЖФХ. 2003. **77**. № 7. С. 1247.

Поступила в редакцию 16.02.05

ELECTRONIC SPECTRA AND MOLECULAR CONSTANTS OF MOLYBDENUM MONONITRIDE (MoN)

Yu.Ya. Kuzyakov, E.N. Moskvitina

(Division of Laser Chemistry)

Electronic spectra and structure of molybdenum mononitride have been investigated. Electronic- vibrational-rotational spectrum of molybdenum mononitride has been obtained by the intracavity laser method. Molecular constants of ground $X^4\Sigma$ and excited $A4\Pi$ states have been calculated. The set of the most reliable molecular constants of the molecule MoN has been recommended on the base of experimental data obtained and the review of all available information concerning MoN spectra studied.