

УДК 535.338+621.373.826

ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПОСТОЯННЫЕ МОНОНИТРИДА ЦИРКОНИЯ

Е.Н. Москвитина, Ю.Я. Кузяков

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

Рассмотрены электронные спектры и строение мононитрида циркония. Методом внутривибрационной лазерной спектроскопии в области 550–750 нм получен электронно-колебательно-вращательный спектр молекулы ZrN. Проведен анализ спектра и рассчитаны молекулярные постоянные основного ($X^2\Sigma$) и возбужденного ($A^2\Pi$) электронных состояний. На основании полученных экспериментальных данных и критического анализа всей информации об исследованиях спектра ZrN рекомендован набор наиболее достоверных значений молекулярных постоянных.

Ключевые слова: внутривибрационная лазерная спектроскопия, электронные спектры, мононитрид циркония, молекулярные постоянные.

Введение

В последние годы спектроскопическое изучение двухатомных молекул переходных металлов IV, V и VI групп Периодической системы привлекает повышенное внимание исследователей [1, 2], что связано с возможностью получать информацию о химических связях в молекулах с сильными спин-орбитальными взаимодействиями. Особое место среди них занимают нитриды, интерес к которым связан как с проблемой разрушения высокотемпературных конструкционных материалов, содержащих переходные металлы, так и с астрофизическими исследованиями, поскольку мононитриды Ti, Zr, Mo и др. содержатся в атмосфере холодных M- и S-типах звезд [3]. Исследование электронных спектров дает возможность определять набор молекулярных постоянных, необходимых для проведения точных расчетов *ab initio*, выполненных с учетом спин-орбитальных взаимодействий. Однако накопление экспериментальных данных для мононитридов переходных металлов происходит относительно медленными темпами, поскольку возникают трудности, связанные с получением спектров с высоким разрешением в широком диапазоне длин волн и с анализом структуры этих сложных многолинейчатых спектров. В настоящей работе представлены результаты изучения электронного спектра молекулы мононитрида циркония (ZrN) в области 550–750 нм методом внутривибрационной лазерной спектроскопии (ВРЛС).

Электронный спектр ZrN впервые был получен в 1975 г. [4] при исследовании поглощения плазмы импульсного разряда в парах тетрагалогенидов циркония

с азотом и водородом. 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. Две группы интенсивных полос с красным оттенением в области 560–590 нм, по аналогии с изоэлектронной молекулой TiN [5], были отнесены к переходу $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$. В 1976 г. это отнесение подтверждено на основании анализа вращательной структуры (0–0)-полосы [6].

В работах [4, 6] наблюдали лишь полосы секвенций с $\Delta v = 0$, что не позволило определить колебательные постоянные мононитрида циркония. Колебательная частота основного состояния $X^2\Sigma^+$ ZrN впервые определена в [7] на основании анализа структуры электронного спектра молекул ZrN, изолированных в Ar-матрице. Близкое к данным, приведенным в [7], значение $\Delta G_{1/2}$ (991 см^{-1}) для основного состояния было определено в [8] по ИК-спектрам ZrN в Kr-матрице. В работе [9] по ИК-спектрам ZrN в газовой фазе определено значение $\Delta G_{1/2}$, равное $936,6 \text{ см}^{-1}$. Однако эта величина, по-видимому, была сильно занижена, как и определенная в этой работе частота колебания молекулы TiN [10].

В 1988 г. в работе [11] анализ колебательной структуры был выполнен в предположении, что интенсивные канты в области 560–590 нм принадлежат двум электронным переходам $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi-A'^2\Delta$, имеющим общее верхнее состояние $A^2\Pi$. Для основного ($X^2\Sigma^+$) и возбужденного ($A^2\Pi$) состояний молекул Zr ^{14}N и Zr ^{15}N были определены колебательные постоянные, равные $981,8 \pm 3,3$ и $945,1 \pm 3,0 \text{ см}^{-1}$ для $X^2\Sigma^+$ и

889,8±4,0 и 853,2±3,7 см⁻¹ для А²Π соответственно. Позднее, в 1998 г., в работе [12] по спектру лазерно-индуцированной флуоресценции полос (1,1) и (2,2) А²Π-Х²Σ⁺ были получены значения ΔG_{1/2} для состояний А²Π и Х²Σ⁺, равные соответственно 958 и 995 см⁻¹.

Анализ литературных данных показывает, что колебательные постоянные основного (Х²Σ⁺) и возбужденного (А²Π) состояний молекулы ZrN, приведенные в работах [7–9, 11, 12], отличаются между собой, что требует проведения исследований для получения наиболее надежных результатов.

Цель данной работы – использование высокочувствительного метода ВРЛС для получения новой информации об электронном переходе А²Π-Х²Σ⁺ молекулы ZrN в области 550–750 нм и уточнения молекулярных постоянных.

Экспериментальная часть

Мы исследовали электронный спектр поглощения ZrN в области 560–700 нм. Экспериментальная установка подробно описана в работе [13]. Образование молекул нитрида циркония происходило при разряде конденсатора (0,5 мкф, 10кВ) через смесь паров тетрахлорида циркония с азотом. Кристаллический ZrCl₄ имел следующее природное содержание изотопов циркония (%): ⁹⁰Zr (51,45), ⁹¹Zr (11,23), ⁹²Zr (17,11), ⁹⁴Zr (17,40), ⁹⁶Zr (2,8). В лодочке из кварца его помещали в кварцевую разрядную трубку длиной 30 см и диаметром 2 см, снабженную молибденовыми электродами. Для создания необходимой упругости пара ZrCl₄ разрядную трубку нагревали до температуры ~180°C (общее давление газовой смеси варьировали от 2 до 8 мм рт. ст.) и помещали в резонатор широкополосного лазера на растворах органических красителей с ламповой накачкой. В работе использовали следующие красители: родамин незамещенный, родамин-6Ж, родамин В, оксазин-17, крезил-виолет, ЛК-678, ЛК-740, ЛК-790 и их смеси в изопропиловом спирте, которые перекрывали спектральный диапазон 550–850 нм при ширине полосы генерации одного красителя 10–20 нм. Длительность импульса генерации составила 10 мкс, что соответствует эффективной толщине поглощающего слоя ~1000 м. Задержку начала импульса генерации относительно начала импульса тока через разрядную трубку варьировали в пределах 0–400 мкс. Спектры регистрировали на спектрографе ДФС-3 с дифракционной решеткой 75шт/мм, работающей в 24–28 порядках. Обратная линейная дисперсия составляла 0,1 нм/мм. Эталонным спектром служил разряд в

Fe-полем катоде. Точность определения положения неперекрываемых линий вращательной структуры составляла 0,03 см⁻¹. Использование метода внутррезонаторной лазерной спектроскопии позволило получить ранее неизвестные канты полос, в том числе полос прогрессий с Δν = -1. Для надежного отнесения полос использовали изотоп ¹⁵N₂ (95% обогащения).

Результаты и их обсуждение

Электронный спектр поглощения моонитрида циркония в области 550–700 нм состоит из двух систем полос примерно равной интенсивности, имеющих красное отклонение. Наиболее интенсивные канты (564,74 и 583,51 нм) относятся к R₂- и Q₁-кантам 0–0-полос мультиплетных компонент А²Π_{3/2}-Х²Σ⁺ и А²Π_{1/2}-Х²Σ⁺ соответственно. Обе 0–0-полосы имеют хорошо развитую вращательную структуру, выделяется нулевой промежуток, линии в ветвях прослеживаются до кантов. Идентифицированы все 12 ветвей, которые наблюдались для перехода А²Π(a)-Х²Σ⁺(b) [14]. Компоненты мультиплета А²Π_{3/2}-Х²Σ⁺ и А²Π_{1/2}-Х²Σ⁺ сильно различаются между собой по внешнему виду. Компонента А²Π_{1/2}-Х²Σ⁺ имеет относительно простой вид, в ней легко выделяются полосы секвенций от Δν = 0 до ν' = ν'' = 4. Расстояние между кантами Q₁ изменяется незначительно и составляет около 40 см⁻¹. В полосах 0–0, 1–1 и 2–2 для молекул Zr¹⁴N и Zr¹⁵N впервые зарегистрированы (не наблюдавшиеся другими авторами) канты в ветвях R₁, отстоящие от кантов Q₁ на расстоянии ~122 см⁻¹. Особенностью вращательной структуры ветвей R₁ является образование двух кантов. В случае молекулы Zr¹⁴N образуются канты 17255,35 и 17240,87 см⁻¹ в полосе (0,0) и канты 17213,6 и 17200,26 см⁻¹ в полосе (1,1). В случае Zr¹⁵N образуются канты 17249,08 и 17233,24 см⁻¹ в полосе (0,0) и канты 17206,6 и 17191,94 см⁻¹ в полосе (1,1).

Компонента А²Π_{3/2}-Х²Σ⁺ имеет значительно более сложную колебательную структуру с большим числом возмущений, проявляющихся в резком нарушении регулярности в положении полос. В отличие от компоненты А²Π_{1/2}-Х²Σ⁺, полосы секвенций явно не прослеживаются. Некоторые интенсивные канты имеют вид широких линий. Так, кант R₂ полосы 1–1 (17670,8 см⁻¹), имеющий вид линии (изотопический сдвиг между кантами Zr¹⁴N и Zr¹⁵N составляет 1,06 см⁻¹), отстоит от канта R₂ (0–0) на расстоянии 31,5 см⁻¹, в то время как расстояние между кантами R₂ (1–1) и R₂ (2–2) составляет 59,94 см⁻¹. Расстояние между кантами R₂ полос (2–2), (3–3) и (4–4)

около 40 см^{-1} , как и в компоненте $A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$. В полосах 0–0 и 1–1 впервые зарегистрированы кванты в ветвях R_{21} . Для обеих компонент наблюдались полосы прогрессий с $\Delta v = -1$.

В табл. 1 приведены значения длин волн, волновые числа наблюдаемых квантов полос молекул $Zr^{14}N$ и $Zr^{15}N$ и их отнесение. Колебательные постоянные комбинирующих электронных состояний были рассчитаны по известным формулам [14] с учетом первых коэффициентов ангармоничности. Использовались значения нулевых линий, рассчитанных по квантам Q_1 и R_2 для соответствующих полос перехода $^2\Pi-^2\Sigma$ по

формулам, учитывающим постоянную центробежного расщепления. Для полосы 0–0 при расчете использовали постоянные, полученные в нашей работе, а для полос 1–1 и 2–2 – данные [15–17]. На основании полученных постоянных были рассчитаны изотопные сдвиги по ^{15}N , значения которых хорошо согласуются с наблюдаемыми, что является подтверждением правильности анализа колебательной структуры. Колебательные постоянные для электронных состояний $X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi$ приведены в табл. 2. Значение ρ оценено по величинам экспериментально наблюдаемых частот ν ($\rho_{\text{экс}} = \nu(Zr^{15}N)/\nu(Zr^{14}N) = 0,9700$), находится в хоро-

Таблица 1

Наблюдаемые кванты полос молекул $Zr^{14}N$ и $Zr^{15}N$ и их отнесение

$\nu'-\nu''$	Тип ветви	Переход	λ , нм $Zr^{14}N$	ν см^{-1} $Zr^{14}N$	λ , нм $Zr^{15}N$	ν см^{-1} $Zr^{15}N$
0–0	R_{21}	$A^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma$	560,79	17827,1	561,03	17819,3
0–0	R_2	$A^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma$	564,755	17701,87	564,810	17700,13
1–1	R_{21}	$A^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma$	562,59	17769,9	562,79	17763,6
1–1	R_2	$A^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma$	565,748	17670,78	565,782	17669,72
2–2	R_{21}	$A^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma$	563,82	17731,3	564,01	17725,3
2–2	R_2	$A^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma$	567,644	17611,78	567,664	17611,14
3–3	R_2	$A^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma$	568,905	17572,73	568,769	17576,93
4–4	R_2	$A^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma$	570,109	17535,61	569,888	17542,42
0–0	R_1	$A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma$	579,369 579,819	17255,35 17241,95	579,573 580,104	17249,28 17233,48
0–0	Q_1	$A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma$	583,507	17132,98	583,523	17132,52
1–1	R_1	$A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma$	580,706 581,225	17215,62 17200,26	580,873 580,104	17210,67 17195,88
1–1	Q_1	$A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma$	584,940	17091,22	584,942	17090,96
2–2	R_1	$A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma$	582,570 583,080	17160,55 17145,53	582,807 583,308	17153,57 17138,82
2–2	Q_1	$A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma$	586,342	17050,14	586,404	17048,36
3–3	Q_1	$A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma$	587,521	17009,81	587,771	17008,69
4–4	Q_1	$A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma$	589,172	16968,25	589,240	16966,28
0–1	R_2	$A^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma$	597,770	16732,23	596,893	16762,81
1–2	R_2	$A^2\Pi_{3/2}-X^2\Sigma$	598,735	16697,23	–	–
0–1	Q_1	$A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma$	619,602	16135,90	618,541	16164,72
1–2	Q_1	$A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma$	621,162	16094,40	–	–
2–3	Q_1	$A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma$	622,832	16051,23	–	–
0–0	Q_1	$A^2\Pi_{3/2}-a^2\Delta_{5/2}$	570,567	17521,55	570,345	17528,35
1–1	Q_1	$A^2\Pi_{3/2}-a^2\Delta_{5/2}$	573,004	17447,03	572,83	17456,80
2–2	Q_1	$A^2\Pi_{3/2}-a^2\Delta_{5/2}$	575,455	17372,71	–	–
0–0	Q_1	$A^2\Pi_{1/2}-a^2\Delta_{3/2}$	589,360	16962,83	589,159	16968,62
1–1	Q_1	$A^2\Pi_{1/2}-a^2\Delta_{3/2}$	591,962	16888,28	591,635	16897,62
2–2	Q_1	$A^2\Pi_{1/2}-a^2\Delta_{3/2}$	594,650	16812,82	594,181	16825,19

шем согласии с рассчитанным значением ($\rho_{\text{расч}} = [\mu(\text{Zr}^{14}\text{N})/\mu(\text{Zr}^{15}\text{N})]^{1/2} = 0,9707$, где μ – приведенная масса). Следует отметить, что наблюдались полосы с развитой вращательной структурой, принадлежащие молекулам Zr^{14}N и Zr^{15}N (16360,27 и 16358,20 см^{-1}), которые не были идентифицированы. Возможно, они принадлежат переходу ${}^2\Sigma\text{-X } {}^2\Sigma$.

При анализе колебательной структуры компонент $\text{A}^2\Pi_{3/2}\text{-X}^2\Sigma^+$ и $\text{A}^2\Pi_{1/2}\text{-X}^2\Sigma^+$ в длинноволновой области спектра обнаружены секвенции с расстоянием между кантами около 75 см^{-1} , которые не укладываются в схему перехода $\text{A}^2\Pi\text{-X}^2\Sigma^+$. Мы предположили, что эти полосы связаны с новым электронным переходом в молекуле ZrN . Поскольку расстояние между кантами 570, 379 и 589, 357 нм близко к дублетному расщеплению в $\text{A}^2\Pi$ -состоянии, мы предположили, что оно является верхним состоянием этого перехода.

Для изоэлектронных молекул ScO , YO , LaO экспериментально наблюдали состояния ${}^2\Delta$, лежащие по энергии ниже состояний ${}^2\Pi$, причем при переходе от ScO к LaO $T_e({}^2\Delta)$ уменьшается на 7000 см^{-1} . Расчет низколежащих электронных состояний моонитрида титана [18] показывает, что для молекулы TiN должно наблюдаться ${}^2\Delta$ -состояние с $T_e = 6400 \text{ см}^{-1}$. Исходя из этих аналогий для молекулы ZrN можно предположить существование ${}^2\Delta$ -состояния, лежащего вблизи основного электронного состояния $\text{X}^2\Sigma^+$. Если отнести

канты 570, 567 и 589, 360 нм к подсистемам $\text{A}^2\Pi_{3/2}\text{-a}^2\Delta_{5/2}$ и $\text{A}^2\Pi_{1/2}\text{-a}^2\Delta_{3/2}$ соответственно, то ${}^2\Delta$ -состояние будет иметь дублетное расщепление около 10 см^{-1} и отстоять от основного состояния на расстоянии $\sim 170 \text{ см}^{-1}$. В табл. 1 приведены значения длин волн и волновые числа наблюдаемых кантов полос и их предположительное отнесение для молекул Zr^{14}N и Zr^{15}N . Установить точно тип перехода для наблюдаемых полос можно лишь после вращательно-го анализа. Для этого перехода не удалось наблюдать полос прогрессий, и колебательные постоянные $\text{a}^2\Delta$ -состояния были оценены по величине ω' для $\text{A}^2\Pi$ -состояния, полученной в результате анализа A-X -системы. Экспериментальные данные показывают, что в состоянии $\text{A}^2\Pi$ для уровней $\nu' = 1$ или $\nu' = 2$ компоненты ${}^2\Pi_{3/2}$ наблюдается сильное колебательное возмущение. Возмущающим состоянием является, по-видимому, лежащее вблизи состояние ${}^4\Sigma$, которое, согласно интеркомбинационному запрету $\Delta S = 0$, не взаимодействует с основным состоянием $\text{X}^2\Sigma$, но может взаимодействовать с компонентой $\text{A}^2\Pi_{3/2}$, так как ${}^4\Sigma_{3/2}$ имеет то же значение квантового числа Ω .

Вращательный анализ

В данной работе были измерены и отнесены более 600 вращательных линий в 0–0-полосах компонент $\text{A}^2\Pi_{3/2}\text{-X}^2\Sigma^+$ и $\text{A}^2\Pi_{1/2}\text{-X}^2\Sigma^+$ для молекул Zr^{14}N и

Таблица 2

Молекулярные постоянные Zr^{14}N и Zr^{15}N (см^{-1})

Постоянные	$\text{X}^2\Sigma^+$		$\text{A}^2\Pi$	
	Zr^{14}N	Zr^{15}N	Zr^{14}N	Zr^{15}N
B_0	0,48297(7)	0,45511(6)	0,47991(2)	0,45217(1)
$D_0 \times 10^7$	4,54(3)	4,41(3)	5,56(4)	4,94(2)
$\gamma_0 \times 10^2$	-0,242(2)	-0,228		
p			-0,09552(5)	-0,10253(5)
$q \times 10^4$			-2,1(4)	-2,22(2)
$T_{1/2}$			17118,06(2)	
$T_{3/2}$			17685,08(2)	
A			574,32(1)	
B_e	0,48416			
α_e	0,00240			
ω_e''	1005,5 \pm 0,9	976,1(\pm 0,9)	971,1(\pm 0,9)	942,7(\pm 0,9)
$\omega_e x_e''$	4,2 \pm 0,5	3,96(\pm 0,5)	7,05(\pm 0,5)	6,64(\pm 0,5)
r_e	1,6953 A			

Zr¹⁵N. В ветвях *Q*, *P* и *R* наблюдали вращательные линии с квантовыми числами до $J = 65,5$. Поскольку имеющиеся в литературе вращательные постоянные не описывали положения R_1 и R_{21} кантов, мы провели новый вращательный анализ, используя стандартные комбинационные разности для ветвей *Q*, *P* и *R* до $J = 60,5$. Полученные вращательные постоянные (табл. 2) с точностью $\pm 3 \text{ см}^{-1}$ описывают положение кантов R_1 и R_{21} для полос 0–0, 1–1 и 2–2. В табл. 2 приведены молекулярные постоянные (см^{-1}) для Zr¹⁴N и Zr¹⁵N.

В заключение следует отметить, что полученные в нашей работе значения ω_e'' и ω_e' в пределах ошибок эксперимента совпадают с величинами, полученными в работе [10]. Эти значения постоянных можно рекомендовать как наиболее достоверные. Для

молекулы ZrN относительно легко получают полосы переходов с $\Delta v = 0$. Получение секвенций с $\Delta v \neq 0$ представляет значительные трудности. Даже при использовании метода внутривибрационной лазерной спектроскопии с его уникальной чувствительностью не удалось зарегистрировать полосы секвенций с $\Delta v \geq 2$. По-видимому, это связано с малыми вероятностями переходов для всех секвенций, кроме главной. Были рассчитаны вероятности электронно-колебательных переходов (значения факторов Франка–Кондона) для системы А–Х в приближении гармонического осциллятора [19]. Расчет показал, что интенсивность полос 0–1 на два порядка, а полос 0–2 на пять порядков меньше, чем полосы 0–0. Если учесть уменьшение заселенности уровней при увеличении v'' , то это различие будет еще более резким.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Leung J.W.-H., Ma Tongmei, Cheung A.S.C. // J. Mol. Spectrosc. 2005. **229**. P. 108.
2. Ram R.S., Adam A.G., Tsouli A., Lievin J., and Bernath P.F. // J. Mol. Spectrosc. 2000. **202**. P. 116.
3. Ram R.S., Bernath P.F., Wallace L. // Astrophys. J. Suppl. Ser. 1996. **107**. P. 443.
4. Кабанкова Н.Н., Москвитина Е.Н., Кузяков Ю.Я. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1975. **16**. С. 620.
5. Dunn T.M., Hanson L.K., Rubinson K.A. // Can. J. Phys. 1970. **48**. P. 1657.
6. Bates J.K., Dunn T.M. // Can. J. Phys. 1976. **54**. P. 1216.
7. Bates J. K., Grue D.M. // High Temperature Science. 1978. **10**. P. 27.
8. Froben F.J. // J. Mol. Struct. 1980. **60**. P. 293.
9. DeVore T.C., Gallaher T.N. // J. Chem. Phys. 1979. **70**. P. 3497.
10. Степанов П.И., Москвитина Е.Н., Кузяков Ю.Я. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1984. **25**. С. 15.
11. Степанов П.И., Москвитина Е.Н., Кузяков Ю.Я. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1988. **29**. С. 147.
12. He Jiang, Ma Chensheng, Cheung A. S-C. // Chem. Phys. Lett. 1998. **295**. P. 535.
13. Кузяков Ю.Я., Москвитина Е.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2001. **42**. № 3. С. 162.
14. Herzberg G. // Spectra of Diatomic Molecules. 2nd /Ed. Van Nostrand. N.Y., 1950.
15. Chan C. M-T., Li Haiyang, Sze N.S-K., Cheung A.S-C. // J. Mol. Spectrosc. 1996. **180**. P. 145.
16. Chan C. M-T., Li Haiyang, Cheun A. S-C. // Chem. Phys. Lett. 1997. **269**. P. 49.
17. Li H., Chan C. M-T., Cheung A. S-C. // J. Mol. Spectrosc. 1996. **176**. P. 219.
18. Bauschlicher C.W. // Chem. Phys. Lett. 1983. **100**. P. 515.
19. Nicholls R.W. // J. Chem. Phys. 1981. **74**. P. 6980.

Поступила в редакцию 16.04.09

ELECTRONIC SPECTRA AND MOLECULAR CONSTANTS OF ZIRCONIUM MONONITRIDE

Ye.N. Moskvitina, Yu.Ya. Kuzyakov

(Division of Laser Chemistry)

Electronic spectra and structure of the zirconium mononitride were considered. Electronic-vibrational-rotational spectra of the ZrN molecule were obtained by intracavity laser spectroscopy in the region 550–759 nm. Spectrum of the ZrN was analysed and molecular constants of ground (X^2Y) and excited ($A^2\Pi$) electronic states were calculated. Based on experimental data obtained and critical comprehensive analyzes of all available information about ZrN spectrum investigation, the most reliable set of molecular constants were recommended.

Key words: intracavity laser spectroscopy, electronic spectra, zirconium mononitride, molecular constants.

Сведения об авторах: Москвитина Евгения Николаевна – ст. науч. сотр. кафедры лазерной химии химического факультета МГУ, канд. хим. наук (moskvitina@laser.chem.msu.ru); Кузяков Юрий Яковлевич – профессор кафедры лазерной химии химического факультета МГУ, докт. хим. наук (kuzyakov@laser.chem.msu.ru).