

Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации  
Федеральное государственное  
бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ  
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,  
НАНОСТРУКТУР  
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS  
OF THE STUDY OF CLUSTERS,  
NANOSTRUCTURES AND  
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY  
IZUČENIÂ KLASTEROV,  
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

*МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ*

выпуск 11

ТВЕРЬ 2019

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

**Официальный сайт издания в сети Интернет:**

**<https://www.physchemaspects.ru>**

**Ф50** Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – Вып. 11. – 680 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

*Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*

*Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov*

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2019

© Тверской государственной  
университет, 2019

## АНАЛИЗ КЛАСТЕРООБРАЗОВАНИЯ В МОДЕЛИРУЕМЫХ КРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ

О.Р. Стародуб, В.М. Воскресенский, Н.В. Сидоров, М.Н. Палатников  
Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья  
им. И.В. Тананаева – обособленное подразделение ФГБУН Федерального  
исследовательского центра «Кольский научный центр Российской академии наук»  
184209, Россия, Мурманская область, Апатиты, Академгородок, 26а  
ol\_star@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.232

**Аннотация:** В рамках полуклассической атомистической модели исследовались процессы кластеризации в кристалле ниобата лития  $LiNbO_3$ . Компьютерное моделирование энергетически равновесного кластера кристалла ниобата лития  $LiNbO_3$  на основании кислородных октаэдров показало, что энергетически более выгодным является случайный заброс ионов в центр октаэдра. Также показано, что кластер с конгруэнтным соотношением  $Li/Nb$  оказывается оптимальным по энергии при любом методе заброса и величине модельного кластера.

**Ключевые слова:** ниобат лития, моделирование, кластеры, вакансионные модели, дефекты подрешётки, монокристаллы, сегнетоэлектрики

### 1. Введение

Компьютерные эксперименты, иначе называемые компьютерным моделированием, неотъемлемая и мощная часть современных исследований. Современные технологии создания монокристаллических материалов невозможны без предварительной обкатки их при помощи компьютерного моделирования, которое в значительной мере удешевляет подбор и оптимизацию параметров процесса и материалов, как исходных, так и заданных.

Управление тонкими особенностями структуры и физическими свойствами путем легирования и изменения стехиометрии является значимой особенностью нестехиометрических кристаллов с кислородно-октаэдрической структурой [1]. Кристалл ниобата лития, будучи кислородно-октаэдрическим сегнетоэлектриком, характеризуется широким спектральным диапазоном пропускания в видимой области и примечателен своими высокими электрооптическими и нелинейно-оптическими коэффициентами. Упорядочение структурных единиц кристалла вдоль полярной оси и «возмущение» кислородных октаэдров  $VO_6$  в кристалле  $LiNbO_3$  существенно варьируется при изменении его состава при легировании или изменении стехиометрии (отношения  $Li/Nb$ ) [2]. При этом в структуре кристалла образуются многочисленные точечные дефекты в виде неправильно расположенных вакантных октаэдров и катионов, основными из которых являются катионы ниобия, расположенные в позициях катионов лития. Дефекты могут

ассоциироваться в малые кластеры, размер которых составляет от нескольких элементарных ячеек (нанообъекты) до сотен и тысяч атомов [3,4]. Образование кластеров нарушает трансляционную инвариантность кристаллической решетки  $LiNbO_3$  без изменения симметрии элементарной ячейки [5]. Поэтому исследование формирования кластеров различного размера, состава и формы в структуре кристалла  $LiNbO_3$  представляет значительный практический интерес с целью создания материалов с максимальной композиционной однородностью для различных приложений в нелинейной оптике, поскольку прямое экспериментальное исследование структуры и динамики развития кластеров, особенно наноразмерных, в зависимости от состава кристалла весьма затруднено.

Ранее, в работах [6, 7], нами было выполнено моделирование процессов, происходящих при образовании энергетически равновесных кислородно-октаэдрических кластеров в сегнетоэлектрической фазе кристалла ниобата лития в зависимости от состава, и исследовано упорядочение структурных единиц катионной подрешетки и структурные искажения кислородно-октаэдрических кластеров кристалла ниобата лития в рамках полуклассической атомистической модели. Полученные результаты были сопоставлены с данными вакансионных сплит-моделей из работ Доннерберга и Зотова [8, 9], где были впервые разработаны сложные вакансионные сплит-модели для исследования дефектной структуры катионной подрешетки кристалла  $LiNbO_3$ .

В первых работах кластер ниобата лития мы рассматривали как совокупность элементарных ячеек из 30 атомов. Эти ячейки пристраивались друг к другу, образуя кластер величиной до четырёх тысяч ионов. Рассматривались так называемые сосульки – ячейки выстраивались в одну линию вдоль выбранной координатной оси. После этого вычислялось соотношение  $Li/Nb$  и сравнивалось с вакансионными моделями [6]. Наибольший разброс в соотношении  $Li/Nb$  наблюдался при росте модельного кластера вдоль оси  $Z$ , что находит согласие с экспериментом. Самым упорядоченным оказался кластер, выстроенный вдоль оси  $Y$ . Он описывался только одной вакансионной сплит-моделью Доннерберга-Зотова, а именно  $M5/2$ , с произвольным расположением избыточных катионов  $Nb$  в позициях  $Li$  и в соседних пустых октаэдрах, с изменением параметра  $x$  в зависимости от размера исследуемого кластера. Кластер, построенный вдоль оси  $X$ , описывался тремя сплит-моделями.

Впоследствии мы перешли от элементарных ячеек к кислородным октаэдрам. Из нескольких рассмотренных вариантов формы ячейки, наиболее оптимальной формой был признан правильный шестигранник [7]. Применение при расчётах элементарных ячеек изначально имеет недостатки:

1. Структура кластера оказывается разорванной, поскольку реальный кристалл растёт октаэдрами. В разорванных частях октаэдров оказываются дополнительные катионы лития и ниобия, которых в реальных кристаллах нет. Это приводит к не наблюдаемой в реальном кластере электронейтральности стехиометрического кристалла.

2. При трансляции элементарных ячеек стехиометрическое соотношение берётся начальным вариантом берётся, вследствие чего состав кластера после минимизации весьма близок к стехиометрическому, и не включает в себя структурные дефекты вида  $Nb_{Li}, Li_{Nb}$  и т.д. Заброс катионов оказывается также привязан к стехиометрическому соотношению и поэтому сложно сравнивать расчёты с механизмами вакансионных моделей.

После перехода к кислородным октаэдрам нами была получена функция, описывающая зависимость количества октаэдров (позиций  $Li, Nb$  или вакансий) от количества кислородных слоев кластера структуры ниобата лития. Данная функция имеет минимум, определяющий оптимальный по энергии размер кластера. Оказалось, что соотношение  $Li/Nb=1$  приводит к потере электронейтральности кластера, следовательно, стехиометрические кристаллы существовать в своей идеальной форме не могут [7]. А соотношение  $Li/Nb$ , соответствующее конгруэнтному кристаллу, оказалось оптимальным по энергии, что подтверждается экспериментом.

## 2. Методика расчетов

Энергия взаимодействия в кластере рассчитывалась с помощью программы KeClast и комплекса программ минимизации энергии, разработанных нами, с выявлением так называемых «критических» ионов, что дало возможность оптимизировать энергию в моделируемом кластере как за счёт удаления «критических» ионов, так и за счёт их движения. «Критическими» при данных расчётах считаются ионы, имеющие положительную энергию парных взаимодействий с другими атомами, и чье движение или удаление будет приводить к снижению энергии кислородно-октаэдрического кластера. Работа KeClast завершается, когда дальнейшее удаление из кластера «критических» ионов начинает общую энергию кластера повышать. Затем, исходя из полученных данных производится сравнительный анализ структур кластера ниобата лития до и после минимизации энергии [6]. Сами расчётные данные брались из результатов рентгеноструктурного анализа [11].

Расчёт ведётся именно на основании кислородных октаэдров, а не элементарных ячеек по причинам, изложенным выше. Модельный кластер с полными октаэдрами изначально имеет положительную энергию,

забрасывание ионов его энергию уменьшает. В каркас из кислородных октаэдров помещаются катионы  $Li^+$  и  $Nb^{5+}$ , вакансии и примесные ионы либо в центр кислородного октаэдра, либо методом случайного заброса с использованием генератора псевдослучайных чисел с добавлением вихря Мерсена [6]. Производится энергетический подбор каждой позиции, вследствие чего ион забрасывается в то место, где энергия кластера оказывается минимальной. Затем ион (или вакансия) фиксируется и замена ионом другого сорта уже невозможна, и так происходит до полного заполнения всех октаэдров.

### **3. Результаты и их обсуждение**

В статьях [6,7] представлены предыдущие этапы расчётов кластеров в ниобате лития. Данные для расчетов брались из статей [11]. С помощью программы KeClast дефекты моделируются непосредственно в структуре кластеров. Разработанный нами специальный пакет программ позволяет учитывать структурные дефекты в катионной подрешетке и геометрические искажения кислородных октаэдров для сильно разупорядоченных структур, подобных ниобату лития, что позволяет рассматривать уточненное расположение ионов ниобия в кислородных октаэдрах.

В качестве входных параметров использовались типы атомов, формальные заряды, координаты, рассчитанные из рентгеноструктурных данных, представленных в [11]. Энергия кислородно-октаэдрических кластеров минимизировалась методами молекулярной динамики с использованием различных эмпирических и полуэмпирических потенциалов, поскольку псевдопотенциалы для элементов с  $d$ -электронами, используемые в вычислительных комплексах на основе методов *ab initio*, работают для кислородно-октаэдрических кластеров ниобата лития не слишком хорошо. При минимизации энергии кластера применялся итерационный механизм оптимизации критических атомов, включающий как удаление, так и движение критических атомов. В результате проведённых вычислений был выполнен сравнительный анализ структур кластера ниобата лития до и после минимизации энергии.

В предыдущих расчётах [7] нами было показано, что в области соотношения  $Li/Nb$  именно для конгруэнтного кристалла обнаруживается небольшой минимум, подтверждаемый экспериментальными данными о максимальной устойчивости структуры конгруэнтного кристалла. Также было показана невозможность получения кластера ниобата лития стехиометрического состава, поскольку электронейтральность для кластера со стехиометрическим соотношением сохранить не удаётся.

В данной работе рассматривались кластеры двух размеров  $Q7K14$  и  $Q10K20$ , где  $Q$  – максимальное количество октаэдров по стороне правильного шестигранника, являющегося основанием модельного кластера, а  $K$  – максимальное количество кислородных слоев по высоте модельного кластера. Энергия пересчитывалась на формульную единицу в кластере, что позволило расположить графики в одной системе координат (см. рис. 1).

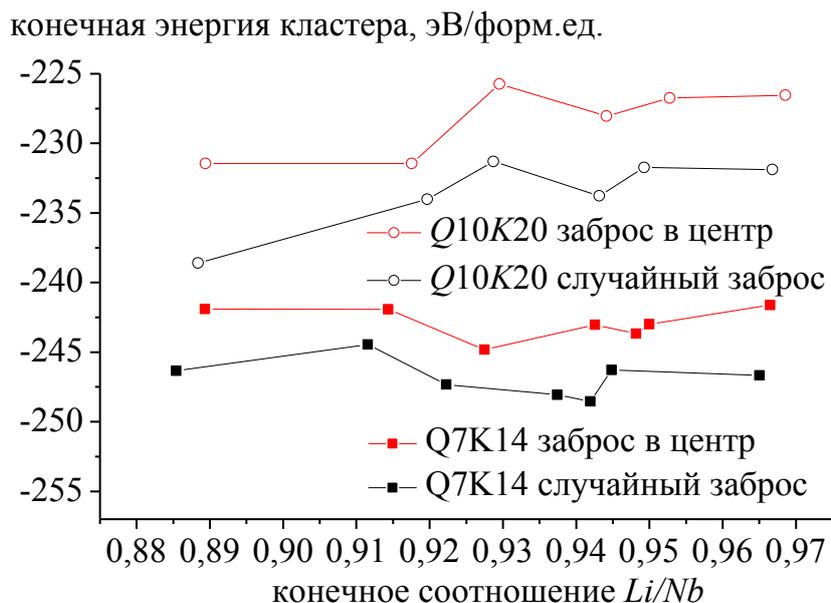


Рис. 1. Зависимость полученной энергии кластера в пересчёте на формульную единицу от конечного соотношения  $Li/Nb$  и способа заброса.

В каждом кластере рассчитывались и рассматривались два случая. В первом случае заброс производился в центр ячейки, во втором – использовался метод случайного заброса. Изначально были заданы следующие значения отношения: 0,92;0,95;0,96;0,975;0,98;1,0. После оптимизации получили соотношения, приведённые в Таблице.

Таблица. Отношения  $Li/Nb$  до и после оптимизации

$Li/Nb$ начальное	После оптимизации			
	$Li/Nb$ заброс в центр		$Li/Nb$ заброс случайный	
	Q7K14	Q10K20	Q7K14	Q10K20
0,92	0,88941	0,88934	0,88837	0,88539
0,95	0,91757	0,91435	0,91967	0,91154
0,96	0,92953	0,9275	0,92871	0,92228
0,975	0,94412	0,94258	0,94315	0,93743
0,98	0,95279	0,94999	0,94928	0,94485
1,0	0,96856	0,96648	0,96678	0,96504

Случайный заброс также снижает энергию, оказываясь более энергетически выгодным, и, следовательно, более приближенным к реальности. Анализируя ход кривой (см. рис. 1), можно заметить, что в диапазоне соотношения  $Li/Nb = 0,94 - 0,95$  наблюдается энергетический минимум, соответствующий конгруэнтному кристаллу, при любом типе заброса.

В то же время заброс в центр снижает соотношение  $Li/Nb$ , сближая его при разных размерах кластеров (см. рис. 2). При обоих типах заброса сохраняется уменьшение соотношения  $Li/Nb$  на  $0,03 - 0,04$  от изначального. Для того, чтобы получить конгруэнтный кристалл, необходимо, соответственно, задать соотношение  $0,976 - 0,977$  – что подтверждается экспериментом.

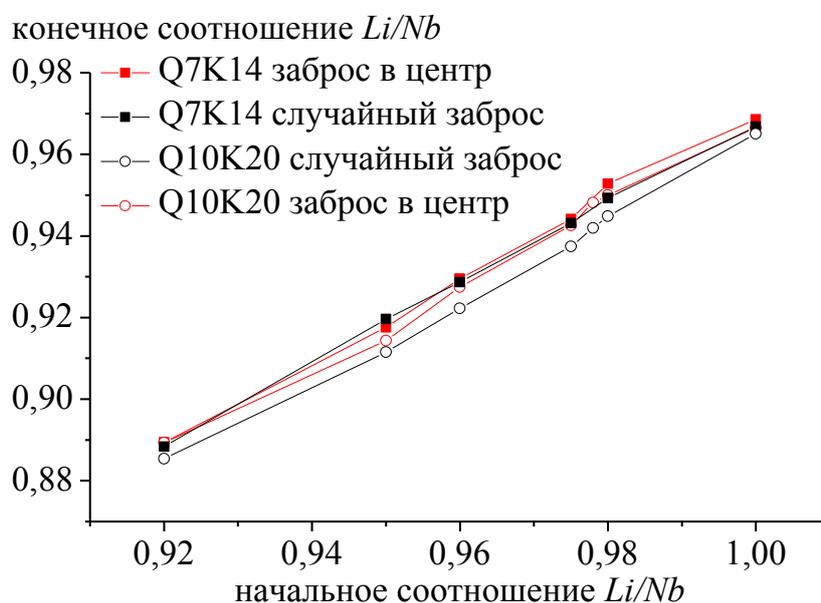


Рис. 2. Зависимость конечного  $Li/Nb$  для разных размеров кластера и способа заброса.

Из графиков, приведённых на рис. 1, видно, что случайный заброс ионов в ячейку более энергетически выгоден, при этом с учетом данных, представленных на рис. 2, можно сделать вывод о том, что заброс в центр даёт меньшую зависимость соотношения  $Li/Nb$  от размера кластера.

#### 4. Заключение

Разработанный нами подход к расчету кластеров в структуре кристалла ниобата лития имеет преимущества перед использованием элементарных ячеек, поскольку даёт возможность сохранить электронейтральность модельного кластера, не разрывая структуру кислородных октаэдров на границах кластера.

Было показано, что энергетически выгодными являются как

конгруэнтное соотношение  $Li/Nb$ , так и определённый размер кластера, который также стремится к структуре конгруэнтного кристалла ниобата лития. Также выявлено, что из-за потери электронейтральности кластер стехиометрического состава не может существовать.

Расчёты показали, что больший размер кластера оказывается для ниобата лития более выгодным вне зависимости от соотношения  $Li/Nb$ , поскольку понижается энергия кластера при пересчёте на формульную единицу. Также на графике (см. рис. 1) видно, что в большинстве случаев имеется энергетический оптимум именно вблизи конгруэнтного соотношения  $Li/Nb$ .

Метод случайного заброса приводит к понижению энергии кластера при расчётах кластеров разных размеров. Следовательно, отклонения от центрального расположения ионов или вакансий в кислородно-октаэдрических кластерах кристалла выгодны с энергетической точки зрения.

### Библиографический список:

1. **Кузьминов, Ю.С.** Электрооптический и нелинейнооптический кристалл ниобата лития / Ю.С. Кузьминов. – М.: Наука, 1987. – 264 с.
2. **Volk, T.** Lithium niobate. Defects, photorefractive and ferroelectric switching / T. Volk, M. Wohlecke. – Berlin: Springer, 2008. – 250 p.
3. **Kokhanchik, L.S.** Characterization of electron-beam recorded microdomain patterns on the nonpolar surface of  $LiNbO_3$  crystal by nondestructive methods / L.S. Kokhanchik, R.V. Gainutdinov, E.D. Mishina, S.D. Lavrov, T.R. Volk // Applied Physics Letters. – 2014. – V. 105. – I.14. – P.142901-1-142901-4.
4. **Лобов, Д.В.** Структура наноразмерных частиц минералов по данным компьютерного и рентгенографического экспериментов: дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.07: защищена: 08.06.2005 / Лобов Денис Владимирович. – Петрозаводск: Петрозаводский государственный университет, 2005. – 154 с.
5. **Бурачас, С.Ф.** Влияние кластерных дефектов переменного состава на оптические и радиационные характеристики оксидных кристаллов / С.Ф. Бурачас, А.А. Васильев, М.С. Ипполитов и др. // Кристаллография. – 2007. – Т. 52. – № 6. – С. 1124-1130.
6. **Воскресенский, В.М.** Моделирование кластерообразования в нелинейнооптическом кристалле ниобата лития / В.М. Воскресенский, О.Р. Стародуб, Н.В. Сидоров и др. // Кристаллография. – 2011. – Т. 56. – № 2. – С. 246-251.
7. **Стародуб, О.Р.** Расчёты кислородно-октаэдрических кластеров в кристалле ниобата лития / О.Р. Стародуб, В.М. Воскресенский, Н.В. Сидоров, М.Н. Палатников // Химическая физика и мезоскопия. – 2019. – Т. 21. – № 2. – С. 227-233.
8. **Donnerberg, H.** Computer-simulation studies of intrinsic defects in  $LiNbO_3$  crystals / H. Donnerberg, S.M. Tomlinson, C.R.A. Catlow, O.F. Schirmer // Physical Review B. – 1989. – V. 40. – I. 17. – P. 11909-11916.
9. **Zotov, N.** Cation substitution models of congruent  $LiNbO_3$  investigated by X-ray and neutron powder diffraction / N. Zotov, H. Boysen, F. Frey et al. // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 1994. – V. 55. – I. 2. – P. 145-152.

10. **Сидоров, Н.В.** Комплексные исследования структурной и оптической однородностей кристаллов ниобата лития с низким эффектом фоторефракции методами коноскопии, фотоиндуцированного светорассеяния и комбинационного рассеяния / Н.В. Сидоров, О.Ю. Пикуль, А.А. Крук и др. // Оптика и спектроскопия. – 2015. – Т. 118. – № 2. – С. 273-282.
11. **Федорова, Е.П.** Упорядочение катионов в кристаллах  $LiNbO_3$  и твердых растворов на его основе / Е.П. Федорова, Л.А. Алешина, Н.В. Сидоров и др. // Неорганические материалы. – 2010. – Т. 46. – № 2. – С. 247-252.

#### References:

1. **Kuz'minov, Yu.S.** Electro-optical and non-linear optical lithium niobate crystal / Yu.S. Kuz'minov. – M.: Nauka, 1987. – 264 p. (In Russian).
2. **Volk, T.** Lithium niobate. Defects, photorefractive and ferroelectric switching / T. Volk, M. Wohlecke. – Berlin: Springer, 2008. – 250 p.
3. **Kokhanchik, L.S.** Characterization of electron-beam recorded microdomain patterns on the nonpolar surface of  $LiNbO_3$  crystal by nondestructive methods / L.S. Kokhanchik, R.V. Gainutdinov, E.D. Mishina, S.D. Lavrov, T.R. Volk // Applied Physics Letters. – 2014. – V. 105. – I.14. – P.142901-1-142901-4.
4. **Lobov, D.V.** The structure of nanosized particles of minerals according to computer and X-ray experiments: dis. ... kand. fiz.-mat. nauk : 01.04.07: zashchishchena: 08.06.2005 / Lobov Denis Vladimirovich. – Petrozavodsk: Petrozavodskij gosudarstvennii universitet, 2005. – 154 p. (In Russian).
5. **Burachas, S.F.** Influence of cluster defects of variable composition on the optical and radiative characteristics of oxide crystals / S. F. Burachas, A.A. Vasil'ev, M.S. Ippolitov, et al. // Crystallography Reports. – 2007. – V. 52. – I. 6. – P. 1088-1093.
6. **Voskresenskii, V.M.** Modeling of cluster formation in nonlinear optical lithium niobate crystal / V.M. Voskresenskii, O.R. Starodub, N.V. Sidorov, et al. // Crystallography Reports. – 2011. – V. 56. – I. 2. – P. 221-226.
7. **Starodub, O.R.** Calculations of oxygen-octahedral clusters in a lithium niobate crystal / O.R. Starodub, V.M. Voskresenskij, N.V. Sidorov, M.N. Palatnikov // Khimicheskaya fizika i mezoskopiya. – 2019. – V. 21. – № 2. – P. 227-233. (In Russian).
8. **Donnerberg, H.** Computer-simulation studies of intrinsic defects in  $LiNbO_3$  crystals / H. Donnerberg, S.M. Tomlinson, C.R.A. Catlow, O.F. Schirmer // Physical Review B. – 1989. – V. 40. – I. 17. – P. 11909-11916.
9. **Zotov, N.** Cation substitution models of congruent  $LiNbO_3$  investigated by X-ray and neutron powder diffraction / N. Zotov, H. Boysen, F. Frey et al. // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 1994. – V. 55. – I. 2. – P. 145-152.
10. **Sidorov, N.V.** Comprehensive studies of the structural and optical uniformity of lithium niobate crystals with a low photorefractive effect by conoscopy, photo-induced light scattering, and Raman scattering / N.V. Sidorov, O.Yu. Pikul', A.A. Kruk et al. // Optika i spektroskopiya. – 2015. – V. 118. – № 2. – P. 273-282. (In Russian).
11. **Fedorova, E.P.** Stoichiometry and doping effects on cation ordering in  $LiNbO_3$  crystals / E.P. Fedorova, L.A. Aleshina, N.V. Sidorov, et al. // Inorganic Materials. – 2010. – V. 46. – I. 2. – P. 206-211.

**ANALYSIS OF CLUSTER FORMATION IN MODELED LITHIUM NIOBATE CRYSTALS**

O.R. Starodub, V.M. Voskresenskij, N.V. Sidorov, M.N. Palatnikov

*Tananaev Institute of Chemistry – Subdivision of the Federal Research Centre «Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences», Apatity, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.232

**Abstract:** *In the framework of the semiclassical atomistic model, clusterization processes in a lithium niobate crystal  $\text{LiNbO}_3$  were investigated. Computer modeling of the energy-equilibrium cluster of a lithium niobate crystal  $\text{LiNbO}_3$  based on oxygen octahedrons has shown that random throwing of ions to the center of the octahedron is more energy-efficient, and a cluster with a congruent Li / Nb ratio is optimal in energy for any casting method and model cluster size .*

**Keywords:** *lithium niobate, modeling, clusters, vacancy models, sublattice defects, single crystals, ferroelectrics.*

*Стародуб Ольга Ростиславна – к.х.н., старший научный сотрудник Института химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева – обособленное подразделение ФГБУН Федерального исследовательского центра «Кольский научный центр Российской академии наук»*

*Воскресенский Вячеслав Михайлович – младший научный сотрудник Института химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева – обособленное подразделение ФГБУН Федерального исследовательского центра «Кольский научный центр Российской академии наук»*

*Сидоров Николай Васильевич – д.ф.-м.н., профессор, и.о. главного научного сотрудника с исполнением обязанностей заведующего сектором колебательной спектроскопии лаборатории материалов электронной техники Института химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева – обособленное подразделение ФГБУН Федерального исследовательского центра «Кольский научный центр Российской академии наук»*

*Палатников Михаил Николаевич – д.т.н., и.о. главного научного сотрудника с сохранением обязанностей заведующего лабораторией материалов электронной техники Института химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева – обособленное подразделение ФГБУН Федерального исследовательского центра «Кольский научный центр Российской академии наук»*

*Olga R. Starodub – Ph. D., Senior Researcher, Tananaev Institute of Chemistry – Subdivision of the Federal Research Centre «Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences»*

*Vyacheslav M. Voskresenskij – Junior Researcher Tananaev Institute of Chemistry – Subdivision of the Federal Research Centre «Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences»*

*Nikolay V. Sidorov – Dr. Sc., Professor, Acting as Chief Researcher and as Head of Sector of Vibrational Spectroscopy of Materials of Electronic Engineering Laboratory, Tananaev Institute of Chemistry – Subdivision of the Federal Research Centre «Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences»*

*Mikhail N. Palatnikov – Dr. Sc., Acting as Chief Researcher and as Head of Materials of Electronic Engineering Laboratory, Tananaev Institute of Chemistry – Subdivision of the Federal Research Centre «Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences»*

Поступила в редакцию/received: 02.09.2019; после рецензирования/reviced: 23.10.2019; принята/accepted 21.11.2019.