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 физико-химических результаты исследований области изучения В процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, межфазные явления нанотермодинамику. включая И работников, инженерно-технических предназначен ДЛЯ научных И 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

<sup>©</sup> Коллектив авторов, 2019

<sup>©</sup> Тверской государственный университет, 2019

#### ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ И АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 544.77.051 Оригинальная статья

## МОЖНО ЛИ УЧЕСТЬ КРИСТАЛЛИЗУЕМОСТЬ СОПРЯЖЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ В ПРОСТЫХ МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ?

П.О. Бабуркин<sup>1</sup>, М.Д. Малышев<sup>1</sup>, В.А. Иванов<sup>2</sup>, П.В. Комаров<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

119991, Россия, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 2 <sup>3</sup>ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН»

119991, Россия, Москва, ул. Вавилова, 28 bggf@bk.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.398

**Аннотация:** Рассмотрен вопрос построения крупнозернистых моделей матриц сопряженных полимеров с учетом их кристаллизации. Выполненное моделирование в рамках метода диссипативной динамики частиц показывает, что для имитации процесса кристаллизации можно использовать гибкие-полугибкие цепи с термодинамически несовместимыми блоками.

Ключевые слова: сопряженные полимеры, кристаллизация, мезоскопическое моделирование.

#### 1. Введение

Органическая электроника — это новый, интенсивно развивающийся раздел науки и техники, ориентированный на поиск новых эффективных полупроводниковых органических материалов и разработку на их основе комплектующих для электронных устройств. Примерами таких устройств являются органические светоизлучающие диоды, используемые в дисплеях, полевые транзисторы и фотоэлектрические элементы органических солнечных батарей [1].

В работе [2], используя технику мезомасштабного моделирования на основе метода диссипативной динамики частиц (ДДЧ) [3], мы рассмотрели возможность управления морфологией фотоактивного слоя с помощью выбора химической структуры блоков сопряженного АВ-сополимера. В качестве прототипа одного блоков рассматривали ИЗ МЫ поли –3 – гексилтиофен семейству (P3HT). P<sub>3</sub>HT относится К  $\pi$ -сопряженных полимерных полупроводников семейства ИЗ политеофенов. Он является одним из наиболее изученных полимеров из-за относительно высокой подвижности носителей зарядов (0,1 cм<sup>2</sup>/B·c) в сочетании с высокой степенью растворимости [4, 5]. РЗНТ имеет жесткую скелетную цепь (персистентная длина ~2,1 нм) [6] с присоединенными к ней боковыми алкильными цепями, которые увеличивают растворимость способен полимера. Данный полимер образовывать слоистые

#### Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов

кристаллические структуры, его степень кристалличности варьируется в 60-70% [4,6,7]. Равновесная кристаллическая поли – 3 – гексилтиофена и ее зависимость от температуры и молекулярной массы до сих пор является предметом споров. Рентгеноструктурный анализ полимерных пленок показывает, что кристаллическая фаза РЗНТ состоит из чередующихся ламеллярных доменов, разделенных аморфными областями. Кристаллические домены образуются благодаря укладке тиофеновых колец в «пачки» из-за  $\pi - \pi$  стекинга. Были выявлены масштабы пространственной следующие характерные организации кристаллических 3.8Å соотносят расстоянием доменов: c тиофеновыми образующими 16Å кольцами, пачки, соотносят расстоянием между цепями РЗНТ, разделенных боковыми алкильными цепями, 28 нм соотносят c пространственной периодичностью ламмелярных доменов [4-7].

Наличие кристаллических доменов в сопряженных полимерах может оказывать сильное влияние на свойства электронных устройств на их основе, такие как морфология укладки цепей в пленках и подвижность носителей зарядов. Однако построение компьютерных моделей, способных воспроизводить структуру кристаллизующихся полимеров, является достаточно сложной задачей [8]. В данной статье мы рассмотрели вопрос о возможности модификации мезоскопической модели фотоактивного слоя для учета формирования кристаллических доменов в Р3НТ матрице.

#### 2. Описание модели и основные результаты

Разработанная нами ранее крупнозернистая модель фотоактивного слоя полимерных солнечных батарей на основе смеси сопряженного АВсополимера и квантовых точек [2] позволила нам определить область которых в объеме фотоактивного слоя параметров, при формироваться хорошо разделенные токопроводящие пути для носителей зарядов. В качестве единицы масштаба был использован размер квантовой точки (~2,8 нм). Это позволило нам рассматривать квантовые точки как один бид, и в то же время, поскольку выбранный масштаб огрубления примерно соответствует одному статистическому сегменту РЗНТ, в качестве модели полимерной цепи мы использовали модель линейной свободносочлененной цепи. Для учета кристаллизуемости РЗНТ в рамках этой модели мы можем задействовать результаты работ [9, 10]. В первой работе [9] мы показали, что гибкость полимерных цепей может играть ключевую роль в формировании кристаллических областей. Во второй работе [10] мы показали, что мультиблок-сополимер с гибкими и жесткими блоками, когда в условиях плохого растворителя находятся жесткие блоки, зависимости от соотношения длин блоков может образовывать

воспроизводимые вторичные гетерогенные структуры двух морфологий — глобула и «пучок». При этом в случае, когда длина гибких развязок меньше жестких сегментов в конечном состоянии сколлапсировавшей цепи являются конформации типа «пучок». Такие структуры можно рассматривать как фрагмент кристаллической ламели. Таким образом, для учета кристаллизуемости РЗНТ мы можем рассматривать полимерную цепь как мультиблок-сополимер, состоящий из гибких и жестких блоков. Если ввести в модель несовместимость жестких и гибких блоков, что регулируется в ДДЧ параметрами Флори-Хаггинса  $\chi_{ij}$ , мы можем вызвать микрофазное расслоение в системе. В этом случае жесткие блоки должны формировать кристаллические домены, а гибкие блоки аморфные области.

Таким образом, крупнозернистая модель полимерной матрицы Р3НТ с учетом ее кристаллизуемости может быть сформулирована следующим образом. Будем рассматривать полимерную цепь РЗНТ в виде линейной последовательности из N бидов двух типов A и B диаметра  $\sigma = 1$ , фиксированной жесткими связями длины соединенных (см. рис. 1). Частицы типа A образуют жесткие блоки, B — гибкие. Жесткие и гибкие блоки состоят из  $n_s$  и  $n_f$  частиц соответственно. Число гибких и жестких блоков регулировалось параметрами  $N_{\scriptscriptstyle A}$  и  $N_{\scriptscriptstyle B}$ . Таким образом, общая длина цепи равна  $N = N_A n_s + N_B n_f$ . Отметим, что при параметров ДДЧ модели, МЫ используем задании приведенные единицы, т.е. единицей измерения длины служит  $\sigma$ , энергии  $\varepsilon$ , времени  $\tau = (m\sigma/\varepsilon)^{1/2}$  (m – масса), а температуры  $T = \varepsilon/k_B$  ( $k_B$  – постоянная Больцмана). Значения силовой константы є и массы во всех расчетах принимались равными единице.

Жесткость полимерной цепи регулируется трехчастичным гармоническим потенциалом деформации валентного угла:

$$U_{\alpha}^{(angle,1)}(r_{i}, r_{i+1}, r_{i+2}) = \frac{1}{2} k_{\alpha}^{(angle,1)}(\varphi - \pi)^{2}, \varphi = \arccos\left(\frac{r_{i+1,i} \cdot r_{i+1,i+2}}{|r_{i+1,i}||r_{i+1,i+2}|}\right), \tag{1}$$

где  $\alpha = \{AA, AB, BB\}$ ,  $k_{AA}^{angle} = 50k_BT/(\sigma \cdot rad^2)$ ,  $k_{AB}^{angle} = k_{BB}^{angle} = 0$ . Определение угла  $\varphi$  дано на рис. 1. Выбранное значение для  $k_{AA}^{angle}$  позволяет поддерживать длину сегмента Куна  $l_K$  жесткого блока примерно равной длине самого блока (т.е.  $l_K \sim n_s \sigma$ ). В случае гибких блоков  $l_K \sim \sigma$ . Значения остальных параметров ДДЧ модели были выбраны прежними.

Для сформулированной выше модели мы поставили задачу изучить влияния строения полимерной цепи и степени несовместимости блоков A и B на морфологию упорядочения блоков в состоянии равновесия. Как и в работе [2], мы фиксировали длину цепи N = 20. Для простоты мы выбрали

#### Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов

отношение числа блоков  $N_A/N_B=1$ . Для  $n_s$  были выбраны следующие значения: 3,6 и 12, а для  $n_f$  — соответственно значения 2,4 и 8. Строение цепи можно представить в виде  $\left[n_s,n_f\right]_n$  (n — число блоков), и для выбранных параметров соответственно получаем цепи следующего состава:  $\left[3,2\right]_4$ ,  $\left[6,4\right]_2$  и  $\left[12,8\right]_1$ .

Распределение всех компонентов системы в начальном состоянии генерировалось случайным образом кубической ячейке граничными условиями длиной ребра периодическими Моделирование выполнялось в течении 10<sup>6</sup> ДДЧ шагов, что было достаточно для достижения термодинамического равновесия в системе. Состояние равновесия в системе определялось из тех же критериев, что и в работе [10].

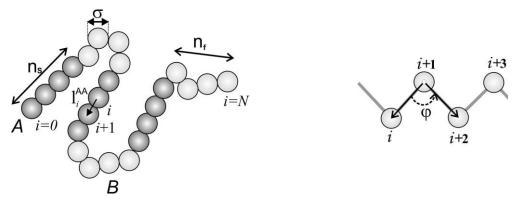


Рис. 1. Модель и основные параметры полимерной цепи:  $n_s$  — длина жесткого блока,  $n_f$  — гибкого, N — общая длина цепи,  $\sigma$  — диаметр частиц,  $\mathbf{1}_i^{AA}$  — пример задания единичного вектора между частицами с номерами i и i+1, используемого для вычисления параметра порядка для жестких блоков. Здесь и далее темным цветом показаны жесткие сегменты цепи (частицы типа A), светлым — гибкие (B).

На рис. 2 продемонстрированы мгновенные снимки состояния ячейки моделирования для системы на основе цепей  $[3,2]_4$ . Отчетливо видно, что жесткие блоки при увеличении несовместимости A и B бидов при  $\chi_{AB} > 5$  формируют хорошо выраженную ламеллярную морфологию с периодом  $4\sigma$ . При увеличении длины жесткого блока увеличивается и размер формирующихся ламелей (см. рис. 3).

Как и в работе [10], для описания степени кристалличности построенных образцов полимерной матрицы МЫ использовали модифицированный алгоритм [11] выделению ПО кластеров упорядоченных цепей с учетом локального выравнивания их сегментов. Выделение кластеров происходит использованием c критериев: биды принадлежат одному кластеру, если расстояние между

ними  $r_{ij} < \sigma$ , а угол между единичными векторами  $\mathbf{e}_i$  и  $\mathbf{e}_j$ , принадлежащих разным цепям, меньше  $10^\circ$  или больше  $170^\circ$ . Единичные векторы  $\mathbf{e}_\alpha$  направлены от частицы с номером  $\alpha-1$  к частице с номером  $\alpha+1$  в выбранной цепи. Степень кристалличности определялась как отношение числа частиц, принадлежащих к упорядоченным кластерам, к общему числу частиц в системе. С помощью кластерного анализа мы получили, что степень кристалличности созданных образцов составляет  $\sim 50\%$ . Отметим, что в выделенных кластерах, как и в работе [10], полимерные цепи не полностью вытянуты, а состоят из частично вытянутых фрагментов, соединенных перегибами.

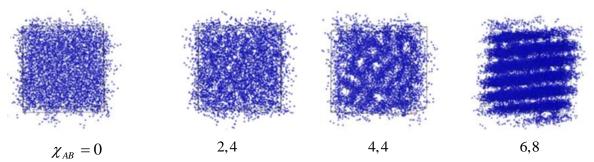


Рис. 2. Мгновенные снимки модели матрицы P3HT при разных значениях параметра Флори-Хаггинса. Для облегчения визуализации на рисунке показаны биды типа A.

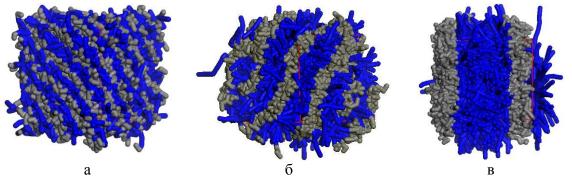


Рис. 3. Конечные состояния в ячейке моделирования при  $\chi_{AB}$  =6.8 для цепей:  $a-\left[3,2\right]_4$ ,  $6-\left[6,4\right]_2$ ,  $B-\left[12,8\right]_1$ .

#### 3. Заключение.

Нами моделирование выполнено использованием метода c диссипативной динамики частиц для изучения роли внутримолекулярной жесткости для моделирования формирования кристаллических доменов в матрицах сопряженных полимеров. В полученных образцах полимерных работе наблюдается [10], некоторое подобие матриц, как ориентационного упорядочения и разделения на микрофазы частично упорядоченных жестких блоков и аморфные области, преимущественно из гибких блоков. Такие системы можно рассматривать

#### Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов

как системы, находящиеся на начальных стадиях кристаллизации. Изменяя соотношение между гибкими и жесткими блоками, можно управлять размерами упорядоченных и неупорядоченных областей. Таким образом, результаты показывают, гибкихполученные ЧТО использование полугибких полимерных цепей с термодинамически несовместимыми блоками позволяет имитировать возникновение кристаллических доменов ламеллярной морфологии, свойственных таким полимерам как РЗНТ. Подчеркнем, что в используемой модели внутримолекулярная жесткость лишь увеличивает упорядоченность цепей в составе доменов, образуемых жесткими блоками, но не приводит к полному распрямлению и цепей. Использованная крупнозернистая выравниванию полимерных модель не может претендовать на описание механизма кристаллизации в сопряженных полимерах, но она может быть полезной для создания моделей образцов с чередующимися аморфными и упорядоченными доменами для последующей конвертации мезоскопических моделей в атомистическое представление с целью дальнейшего моделирования. Для правильного построения систем на основе сопряженных полимеров с кристаллическим упорядочением крупнозернистые модели нуждаются в дальнейшей модификации.

Исследование выполнено при финансовой поддержке  $P\Phi\Phi U$  (проект № 19-53-52004) и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса  $\Phi \Gamma EOV\ BO\ «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».$ 

#### Библиографический список:

- 1. **Mir, S.** Review organic-inorganic hybrid functional materials: an integrated platform for applied technologies / S. Mir, L.A. Nagahara, T. Thundat, et al. // Journal of The Electrochemical Society.  $-2018.-V.\ 165.-I.\ 8.-P.\ B3137-B3156.$
- 2. **Komarov, P.** Controlling the morphology of a hybrid polymer/nanoparticle active layer of solar cells: mesoscopic simulation / P. Komarov, P. Baburkin, V. Ivanov, S.-A. Chen, A. Khokhlov // Molecular Systems Design & Engineering. 2019. V. 4. I. 2. P. 390-395.
- 3. **Groot, R.** Dissipative particle dynamics: bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation / R. Groot, P.B. Warren // The Journal of Chemical Physics. 1997. V. 107. I. 11. P. 4423-4435.
- 4. **Wu, Z.** Temperature and molecular weight dependent hierarchical equilibrium structures in semiconducting poly(3-hexylthiophene) / Z. Wu, A. Petzold, T. Henze, et al. // Macromolecules. -2010.-V.43.-I.10.-P.4646-4653.
- 5. **Wolf, C.** Assessment of molecular dynamics simulations for amorphous poly(3-hexylthiophene) using neutron and x-ray scattering experiments / C. Wolf, K.H. Kanekal, Y.Y. Yimer, et al. / Soft Matter. 2019. V. 15. I. 25. P. 5067-5083.

- 6. **Ro, H.** Poly(3 hexylthiophene) and [6,6] phenyl –c61 butyric acid methyl ester mixing in organic solar cells / H. Ro, B. Akgun, B.T. O'Connor, et al. // Macromolecules. 2012. V. 45. I. 16. P. 6587-6599.
- 7. **Kohn, P.** Crystallization-induced 10-nm structure formation in P3HT/PCBM blends / P. Kohn, Z. Rong, K.H. Scherer, et al. // Macromolecules. 2013. V. 46. I. 10. P. 4002-4013.
- 8. **Greco, C.** Generic model for lamellar self-assembly in conjugated polymers: linking mesoscopic morphology and charge transport in P3HT / C. Greco, A. Melnyk, K. Kremer, D. Andrienko, K.Ch. Daoulas // Macromolecules. 2019. V. 52. I. 3. P. 968-981.
- 9. **Neratova, I.** Collapse of an ab copolymer single chain with alternating blocks of different stiffness / I. Neratova, P.V. Komarov, A.S. Pavlov, V.A. Ivanov // Russian Chemical Bulletin. 2011. V. 60. I. 2. P. 229-237.
- 10. **Markina, A.** Effect of polymer chain stiffness on initial stages of crystallization of polyetherimides: coarse-grained computer simulation / A. Markina, V. Ivanov, P. Komarov, S. Larin, J. Kenny, S. Lyulin // Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics. 2017. V. 55. I. 16. P. 1254-1265.
- 11. **Allen, M.P.** Computer simulation of liquids / M.P. Allen, D.J. Tildesley. Oxford: Clarendon Press; New York: Oxford University Press, 1987. –385 p.

#### **References:**

- 1. **Mir, S.** Review organic-inorganic hybrid functional materials: an integrated platform for applied technologies / S. Mir, L.A. Nagahara, T. Thundat, et al. // Journal of The Electrochemical Society. 2018. V. 165. I. 8. P. B3137-B3156.
- 2. **Komarov, P.** Controlling the morphology of a hybrid polymer/nanoparticle active layer of solar cells: mesoscopic simulation / P. Komarov, P. Baburkin, V. Ivanov, S.-A. Chen, A. Khokhlov // Molecular Systems Design & Engineering. 2019. V. 4. I. 2. P. 390-395.
- 3. **Groot, R.** Dissipative particle dynamics: bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation / R. Groot, P.B. Warren // The Journal of Chemical Physics. 1997. V. 107. I. 11. P. 4423-4435.
- 4. **Wu, Z.** Temperature and molecular weight dependent hierarchical equilibrium structures in semiconducting poly(3-hexylthiophene) / Z. Wu, A. Petzold, T. Henze, et al. // Macromolecules. 2010. V. 43. I. 10. P. 4646-4653.
- 5. **Wolf, C.** Assessment of molecular dynamics simulations for amorphous poly(3-hexylthiophene) using neutron and x-ray scattering experiments / C. Wolf, K.H. Kanekal, Y.Y. Yimer, et al. / Soft Matter. 2019. V. 15. I. 25. P. 5067-5083.
- 6. **Ro, H.** Poly(3 hexylthiophene) and [6,6] phenyl c61 butyric acid methyl ester mixing in organic solar cells / H. Ro, B. Akgun, B.T. O'Connor, et al. // Macromolecules. 2012. V. 45. I. 16. P. 6587-6599.
- 7. **Kohn, P.** Crystallization-induced 10-nm structure formation in P3HT/PCBM blends / P. Kohn, Z. Rong, K.H. Scherer, et al. // Macromolecules. 2013. V. 46. I. 10. P. 4002-4013.
- 8. **Greco, C.** Generic model for lamellar self-assembly in conjugated polymers: linking mesoscopic morphology and charge transport in P3HT / C. Greco, A. Melnyk, K. Kremer, D. Andrienko, K.Ch. Daoulas // Macromolecules. 2019. V. 52. I. 3. P. 968-981.
- 9. Neratova, I. Collapse of an ab copolymer single chain with alternating blocks of different

#### Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов

stiffness / I. Neratova, P.V. Komarov, A.S. Pavlov, V.A. Ivanov // Russian Chemical Bulletin. – 2011. – V. 60. – I. 2. – P. 229-237.

- 10. **Markina, A.** Effect of polymer chain stiffness on initial stages of crystallization of polyetherimides: coarse-grained computer simulation / A. Markina, V. Ivanov, P. Komarov, S. Larin, J. Kenny, S. Lyulin // Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics. 2017. V. 55. I. 16. P. 1254-1265.
- 11. **Allen, M.P.** Computer simulation of liquids / M.P. Allen, D.J. Tildesley. Oxford: Clarendon Press; New York: Oxford University Press, 1987. –385 p.

Original paper

### CAN THE CRYSTALLIZATION OF CONJUGATED POLYMERS BE TAKEN INTO ACCOUNT IN SIMPLE MESOSCOPIC MODELS?

P.O. Baburkin<sup>1</sup>, M.D. Malyshev<sup>1</sup>, V.A. Ivanov<sup>2</sup>, P.V. Komarov<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Tver State University, Tver, Russia

<sup>2</sup>M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

<sup>3</sup>A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds of Russian Academy of Sciences, Moscow,

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.398

**Abstract:** The problem is considered of constructing coarse-grained models of matrices of conjugated polymers with regard to their crystallization. The performed simulation within the framework of the method of dissipative particle dynamics shows that to simulate the crystallization process, flexible-semi-flexible chains with thermodynamically incompatible blocks can be used.

Russia

Keywords: hydrogel, conjugated polymers, crystallization, mesoscopic modeling.

Бабуркин Павел Олегович – аспирант кафедры физической химии, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Малышев Максим Дмитриевич – аспирант кафедры физической химии, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Иванов Виктор Александрович – д.ф.-м.н., доцент, кафедры физики полимеров и кристаллов, ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Комаров Павел Вячеславович — д.ф.-м.н., доцент, кафедра общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», старший научный сотрудник лаборатории физической химии полимеров ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН»

Pavel O. Baburkin – postgraduate student, Department of Physical Chemistry, Tver State University

Maxim D. Malyshev – postgraduate student, Department of Physical Chemistry, Tver State University

Viktor A. Ivanov – Dr. Sc., Docent, Chair of Polymer and Crystal Physics, M.V. Lomonosov Moscow State

University

Pavel V. Komarov – Dr. Sc., Docent, General Physics Department, Tver State University, Senior Researcher Laboratory of Physical Chemistry of Polymers, A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds of Russian Academy of Sciences

Поступила в редакцию/received: 19.09.2019; после рецензирования/revised: 24.10.2019; принята/accepted 17.11.2019.