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**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 10

ТВЕРЬ 2018

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:

www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2018. – Вып. 10. – 708 с.

ISBN 978-5-7609-1395-1

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

Сборник составлен из оригинальных статей 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.

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

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1395-1

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2018

© Тверской государственной
университет, 2018

УДК 549.752/.757:62-492.2

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ КРИСТАЛЛА $\text{LiNbO}_3 : \text{Zn}$ (2,12 мас.% Zn)

Л.А. Бобрева¹, С.М. Маслобоева^{1,2}, Н.В. Сидоров¹, М.Н. Палатников¹

¹Институт 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, Апатиты, Академгородок, 26 а

²филиал ФГБОУ ВО «Мурманский арктический государственный университет»
в г. Апатиты

184209, Апатиты, ул. Лесная, 29
sofia_masloboeva@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.124

Аннотация: Разработан метод получения гомогенно легированной цинком шихты $\text{LiNbO}_3 : \text{Zn}$ ($[\text{Zn}] = 2,44$ мас.%) конгруэнтного состава (отношение $[\text{Li}]/[\text{Nb}] = 0,96$), из которой методом Чохральского выращен кристалл $\text{LiNbO}_3 : \text{Zn}$ с концентрацией Zn ~ 2,12 мас.%. Методом ИК-спектроскопии поглощения в области валентных колебаний OH^- – групп в кристаллах LiNbO_3 конг и $\text{LiNbO}_3 : \text{Zn}$ обнаружены дефектные комплексы $(V_{\text{Li}})^- - \text{OH}^-$.

Ключевые слова: гомогенное легирование, шихта, монокристалл, ниобат лития, валентные колебания OH^- – групп.

1. Введение

Кристаллы LiNbO_3 являются важным материалом оптоэлектроники и нелинейной оптики [1]. Кристалл конгруэнтного состава LiNbO_3 ($[\text{Li}]/[\text{Nb}] = 0,96$) имеет большой дефицит Li_2O , следовательно, содержит много внутренних дефектов [1], перестановок ионов и катионных вакансий, что позволяет легировать его металлическими примесями, такими как Fe, Mg и Zn. Легирование Mg, Zn, In и Sc значительно уменьшает оптическое повреждение в кристалле LiNbO_3 [1,2]. Наиболее радикально устойчивость к оптическому повреждению увеличивается в кристаллах LiNbO_3 , когда концентрация легирующей примеси превышает пороговое значение, которое зависит от электронного строения и валентного состояния легирующей примеси, стехиометрии кристалла. На оптические и другие физические свойства кристалла LiNbO_3 большое влияние оказывают методы синтеза шихты и способы легирования кристаллов [1, 3].

Существует несколько вакансионных сплит-моделей, объясняющих дефектную структуру кристалла LiNbO_3 [1, 4]. Модель Li – вакансий в кристаллической решетке конгруэнтного кристалла LiNbO_3 предполагает наличие ~1 мол.% точечных дефектов в виде катионов ниобия,

занимающих позиции лития (Nb_{Li}^{4+}) и ~ 4 мол. % точечных дефектов в виде вакансий в литиевых (V_{Li}^-) [1]. Точечные дефекты Nb_{Li}^{4+} оказывают заметное влияние на валентные колебания OH^- – групп в кристалле $LiNbO_3$ [5].

Кристаллы $LiNbO_3$, выращенные в воздушной атмосфере, содержащей водяные пары, всегда имеют в своей структуре катионы водорода H^+ , образующие водородные связи с атомами кислорода [6]. Расположение протонов в структуре кристалла $LiNbO_3$ существенно зависит от стехиометрии кристалла и концентрации легирующих примесей [6, 7]. Наличие протонов H^+ в легированных кристаллах $LiNbO_3$ приводит к образованию в структуре кристалла комплексных дефектов типа: $V_{Li}^+ - OH^-$, $Me - OH^-$, $OH^- - Me - OH^-$, где Me – «нефоторефрактивный» или «фоторефрактивный» легирующий металлический катион [6, 7].

Знание позиций легирующих примесей и протона в кристаллической решетке $LiNbO_3$ является необходимым условием для понимания процессов реорганизации структуры кристалла, вызываемых легированием. Поведение OH^- – групп в структуре кристаллов $LiNbO_3$ ввиду их малой концентрации ($\sim 10^{18} - 10^{19}$ см $^{-3}$ [7]) обычно исследуют по ИК-спектрам поглощения. Поскольку протон весьма чувствителен к изменению ближайшего окружения, изменение полосы поглощения в области валентных колебаний OH^- – групп может быть использовано для изучения дефектной структуры кристалла $LiNbO_3$.

Данная работа посвящена получению легированного цинком кристалла ниобата лития и исследованиям методом ИК-спектроскопии комплексных дефектов, обусловленных присутствием в кристалле протонов (H^+).

2. Экспериментальная часть

Шихту $LiNbO_3 : Zn$ для выращивания монокристалла ниобата лития, допированного цинком, синтезировали методом гомогенного легирования, в общем виде описанного в работе [3].

На первом этапе из высокочистых фторидных ниобий содержащих реэкстрактов ($Nb - 85, F - 120$ г/л) получали прекурсор Nb_2O_5 с заданной концентрацией легирующей примеси цинка. Для этого из раствора (реэкстракта) осаждали гидроксид ниобия 25 %-ным раствором NH_4OH , осадок отфильтровывали и промывали деионированной водой для удаления ионов NH_4^+ и F^- . Гидроксид ниобия подсушивали до влажности $\sim 65\%$ и смешивали с раствором $Zn(NO_3)_2$ с заданной концентрацией цинка

при соотношении $T:V_{\text{ж}}=1:1,5$. После перемешивания в течение 1 ч осадок отфильтровывали, промывали деионированной водой, сушили при 120 °С и прокаливали при 1000 °С в течение 3 ч. На втором этапе для синтеза гранулированной шихты $\text{LiNbO}_3:\text{Zn}$ конгруэнтного состава полученный прекурсор $\text{Nb}_2\text{O}_5:\text{Zn}$ смешивали с карбонатом лития в соотношении $[\text{Li}]/[\text{Nb}]=0,946$, смесь тщательно гомогенизировали в течение 24 ч, затем помещали в платиновый тигель и подпрессовывали при помощи пуансона из органического стекла под давлением $\sim 7 \text{ Н/см}^2$. Далее проводили термическую обработку смеси в камерной печи выдерживая ее в течение 5 ч в области температуры предплавления 1240–1250 °С.

Количественное содержание ниобия в исходных растворах и шихте ниобата лития (после ее перевода в раствор) определяли гравиметрическим методом; концентрацию катионных примесей ($\text{Ti}, \text{Mn}, \text{Pb}, \text{Sn}, \text{Ni}, \text{Cr}, \text{Co}, \text{Al}, \text{Mo}, \text{V}, \text{Cu}, \text{Zr}, \text{Ca}, \text{Si}$) в прекурсорах $\text{Nb}_2\text{O}_5:\text{Zn}$ и шихте $\text{LiNbO}_3:\text{Zn}$ – методом спектрального анализа на приборе ДФС-13. Легирующую примесь Zn анализировали методом рентгенофлуоресцентной спектromетрии на приборе Спектроскан МАКС-GV и методом атомно-абсорбционной спектromетрии (ААС) на приборе «Квант-ФА». Содержание Zn в фильтрах и промывных растворах фиксировалось методом ААС. Фтор в растворах определяли потенциометрическим методом на иономере ЭВ-74 с F –селективным электродом ЭВЛ-1МЗ, а в прекурсор $\text{Nb}_2\text{O}_5:\text{Zn}$ и шихте $\text{LiNbO}_3:\text{Zn}$ – методом пирогидролиза, содержание Li в шихте – методом атомно-эмиссионной спектromетрии с индуктивно-связанной плазмой (АЭС-ИСП).

Прекурсор $\text{Nb}_2\text{O}_5:\text{Zn}$ и шихту $\text{LiNbO}_3:\text{Zn}$ исследовали методом рентгенофазового анализа (РФА) на дифрактометре ДРОН-2 со скоростью движения счетчика $2 \text{ град} \cdot \text{мин}^{-1}$ (CuK_α –излучение, графитовый монохроматор). Для идентификации фаз использовали базу данных «JCPDS-ICDD 2002» (Международный центр дифракционных данных).

Кристалл ниобата лития, легированный цинком, выращивали из гомогенно легированной шихты $\text{LiNbO}_3:\text{Zn}$ методом Чохральского в воздушной атмосфере на ростовой установке индукционного типа «Кристалл 2», оснащенной системой автоматического контроля диаметра. Кристалл был монодоменизирован методом высокотемпературного электродиффузионного отжига. Контроль степени монодоменности осуществлялся методом анализа частотной зависимости электрического импеданса и путем определения величины статического пьезомодуля ($d_{33\text{ст}}$) кристаллической були.

Образцы для исследования спектров ИК-поглощения вырезали из

монодоменизированных кристаллов $LiNbO_3:Zn$ в форме прямоугольных параллелепипедов (размеры $\sim 8 \cdot 7 \cdot 6$ мм³), ребра которых совпадали по направлению с кристаллофизическими осям X, Y, Z (Z – полярная ось кристалла). Грани параллелепипедов тщательно полировали. Регистрация спектров производилась с помощью спектрометра IFS 66 v/s фирмы Bruker.

3. Результаты и обсуждение

Для выращивания монокристалла $LiNbO_3:Zn$ получена партия гомогенно легированного прекурсора $Nb_2O_5:Zn$ с концентрацией $[Zn] \sim 2,83$ мас.%. Установлено, что при выбранных условиях эксперимента легирующая примесь Zn в пределах допустимых погрешностей различных методов анализа практически полностью переходит в Nb_2O_5 . Легированный пентаоксид ниобия по регламентированным примесям (мас.‰: $Mn, Ni, Cr, Sn, V, Fe < 3 \cdot 10^{-4}$; $Ti, Al, Co, Mo, Zr, Cu, Pb < 5 \cdot 10^{-4}$; $Ti, Al, Co, Mo, Zr, Cu, Pb < 5 \cdot 10^{-4}$; $Si \sim 5 \cdot 10^{-4}$; $Ca \sim 1,2 \cdot 10^{-3}$) соответствовал техническим условиям для шихты ниобата лития. По данным РФА прекурсор $Nb_2O_5:Zn$ не являлся монофазным. Согласно полученным дифрактограммам, на них фиксировалось образование новой фазы $ZnNb_2O_6$, рефлексы которой совпадали с основной фазой Nb_2O_5 , кроме рефлекса 2,96.

Результаты химического анализа шихты $LiNbO_3:Zn$ показали, что содержание ниобия в ней составляет 62,4 мас.%, лития – 4,4 мас.%. Следовательно, отношение $[Li]/[Nb]$ в шихте соответствует составу конгруэнтного плавления ($R = 0,946$). Индивидуальное содержание микропримесей составляло, мас.‰: $Mn < 2 \cdot 10^{-4}$; $Cu, Al, V, Ni, Cr, Sn, Fe < 3 \cdot 10^{-4}$; $Pb, Ti, Mo, Sb, Co, Bi, Zr < 5 \cdot 10^{-4}$; $Ca, Si < 1 \cdot 10^{-3}$; $Ta < 1 \cdot 10^{-2}$, $F < 1 \cdot 10^{-3}$. Средняя концентрация легирующей примеси в шихте составляла $[Zn] = 2,44$ мас.% и соответствовала расчетному значению с учетом погрешности различных методов анализа. По данным РФА в пределах погрешности данного метода шихта была монофазной и идентифицировалась как $LiNbO_3$.

Из синтезированной шихты $LiNbO_3:2,44$ мас.% Zn был выращен монокристалл ниобата лития с концентрацией $[Zn] = 2,12$ мас.%. Кристалл обнаруживает высокую химическую однородность распределения легирующей примеси Zn . По результатам рентгенофлуоресцентного анализа разница концентраций конусной и торцевой частей монокристалла составляет $\sim 0,005$ мас.%.

На рис. 1 приведены спектры ИК-поглощения в области валентных

колебаний OH^- – групп кристалла $LiNbO_3$ конг и $LiNbO_3 : Zn$ ($[Zn] = 2,12$ мас.%). Видно, что в спектре ИК-поглощения кристалла $LiNbO_3$ конг в области валентных колебаний OH^- – групп проявляется широкая полоса поглощения, ее полуширина составляет ~ 30 cm^{-1} (см. рис. 1, кривая 1). Колебания, ответственные за появление этой полосы поглощения в ИК-спектре, поляризованы перпендикулярно к кристаллографической оси Z [8]. Полоса состоит из трех перекрывающихся компонентов одинаковой поляризации с частотами 3470 cm^{-1} , 3483 cm^{-1} и 3486 cm^{-1} , связанных с различными дефектными центрами, которые могут привлечь протоны (см. рис. 1). Наличие расщепления полосы поглощения на несколько компонентов в кристаллах однозначно свидетельствует о разных позициях OH^- – групп в кристалле и о разных значениях квазиупругих постоянных связей $O-H$ в вакантных октаэдрах и в октаэдрах, занятых основными катионами (Li^+ , Nb^{5+}). В соответствии со сплит-моделью Li – вакансий, такими дефектными центрами являются Nb_{Li}^{4+} и $(V_{Li})^-$ [1]. Отрицательно заряженный дефект $(V_{Li})^-$ притягивает протон (H^+), таким образом, формируются комплексные дефекты $(V_{Li})^- - OH^-$, которым в кристалле $LiNbO_3$ конг, соответствуют полосы поглощения с частотами 3483 и 3486 cm^{-1} [7] (см. рис. 1, кривая 1).

Рис. 1. Спектры ИК-поглощения монокристаллов ниобата лития в области валентных колебаний OH^- – групп: 1 – $LiNbO_3 : Zn$ ($[Zn] = 2,12$ мас.%), 2 – $LiNbO_3$ конг.

Известно, что в кристаллах $LiNbO_3 : Zn$ в широком диапазоне концентраций легирующей примеси наблюдается несколько концентрационных порогов, в области которых происходит изменение

структуры и свойств выращенных кристаллов [1, 9-10]. Исследуемый нами кристалл $LiNbO_3 : Zn$ ($[Zn] = 2,12$ мас.%) выращен из расплава, содержащего $[Zn] = 2,44$ мас.%, что несколько ниже основного концентрационного порога ($[Zn] = 3,04$ мас.% в расплаве), в концентрационной области которого происходит наиболее значимая перестройка структуры кристаллов $LiNbO_3 : Zn$, сопровождаемая резкими аномалиями концентрационных зависимостей свойств [10]. В этой области концентраций ионы цинка Zn^{+2} занимают в кристаллической решетке $LiNbO_3$ позиции лития, вытесняя, таким образом, антиструктурные дефекты Nb_{Li}^{4+} [10]. Поскольку образующий при таком замещении точечный дефект Zn_{Li}^{+} будет иметь положительный эффективный заряд (+1) он не может образовывать новых дефектных комплексов с протонами H^{+} . Таким образом, на ИК-спектрах кристаллов $LiNbO_3 : Zn$ ($[Zn] = 2,12$ мас.%) не регистрируются иные полосы поглощения в области валентных колебаний водородных связей, кроме полосы поглощения с частотой 3483 см^{-1} . Эта полоса, как и в кристаллах $LiNbO_3$ конг, соответствует дефектному комплексу $(V_{Li})^{-} - OH^{-}$, поскольку дефекты в виде литиевых вакансий $(V_{Li})^{-}$ присутствуют как в кристалле $LiNbO_3$ конг, так и в кристалле $LiNbO_3 : Zn$ [1, 10] (см. рис. 1, кривая 2). Кроме того, из рисунка видно, что появление легирующей примеси цинка в структуре ниобата лития приводит к уменьшению ширины полосы поглощения с частотой 3483 см^{-1} , соответствующей комплексному дефекту $(V_{Li})^{-} - OH^{-}$, по сравнению с шириной этой линии для кристалла $LiNbO_3$ конг. По-видимому, гомогенное легирование цинком способствует упорядочению катионной (литиевой) подрешетки кристалла $LiNbO_3 : Zn$ по сравнению с таковой для кристалла $LiNbO_3$ конг, что является необычным для этой области концентраций примеси и требует дополнительного исследования.

4. Заключение

Из гомогенно легированной шихты $LiNbO_3 : Zn$, синтезированной на основе прекурсора $Nb_2O_5 : Zn$, выращен композиционно однородный кристалл $LiNbO_3 : Zn$ ($[Zn] = 2,12$ мас.%).

Методом ИК-спектроскопии поглощения в области валентных колебаний OH^{-} – групп проведено сравнительное исследование кристаллов $LiNbO_3$ конг и $LiNbO_3 : Zn$. Наличие расщепления полосы поглощения на несколько компонентов в кристаллах $LiNbO_3$ конг свидетельствует о разных позициях OH^{-} – групп и о разных значениях квазиупругих постоянных

связей $O-H$ в вакантных октаэдрах и в октаэдрах, занятых основными катионами (Li^+, Nb^{5+}). Полосы поглощения с частотами 3483 и 3486 cm^{-1} подтверждают присутствие в кристалле $LiNbO_3$ конг комплексных дефектов $(V_{Li})^- - OH^-$.

Образующий при легировании кристалла $LiNbO_3 : Zn$ ($[Zn] = 2,12$ мас.%) точечный дефект Zn_{Li}^+ имеет положительный эффективный заряд (+1) и не может образовывать новых дефектных комплексов с протонами H^+ . При этом на ИК-спектрах кристаллов кристалла $LiNbO_3 : Zn$ ($[Zn] = 2,12$ мас.%) не регистрируются иные полосы поглощения в области валентных колебаний водородных связей, кроме полосы поглощения с частотой 3483 cm^{-1} , соответствующей, как и в кристаллах $LiNbO_3$ конг, дефектному комплексу $(V_{Li})^- - OH^-$. Появление в структуре ниобата лития легирующей примеси цинка приводит к уменьшению полуширины полосы поглощения с частотой 3483 cm^{-1} , что свидетельствует об упорядочении катионной (литиевой) подрешетки кристалла $LiNbO_3 : Zn$ по сравнению с таковой для кристалла $LiNbO_3$ конг.

Библиографический список:

1. Сидоров, Н.В. Ниобат лития: дефекты, фоторефракция, колебательный спектр, поляритоны / Н.В. Сидоров, Т.Р. Волк, Б.Н. Маврин, В.Т. Калинин. – М.: Наука, 2003. – 255 с.
2. Lengyel, K. Growth, defect structure, and THz application of stoichiometric lithium niobate / K. Lengyel, A. Petér, L. Kovács, et al. // Applied Physics Reviews. – 2015. – V. 2. – I. 4. – P. 040601-1-040601-28.
3. Маслобоева, С.М. Методы получения легированной шихты ниобата лития для выращивания монокристаллов / С.М. Маслобоева, М.Н. Палатников, Л.Г. Арутюнян, Д.В. Иваненко // Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). – 2017. – № 38 (64). – С. 34-43.
4. Iyi, N. Comparative study of defect structures in lithium niobate with different compositions / N. Iyi, K. Kitamura, F. Izumi, et al. // Journal of Solid State Chemistry. – 1992. – V. 101. – I. 2. – P. 340-352.
5. Kong, Y. OH^- absorption spectra of pure lithium niobate crystals / Y. Kong, Z. Wanlin, C. Xiaojun, et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1999. – V. 11. – № 9. – P. 2139-2145.
6. Cabrera, J.M. Hydrogen in lithium niobate / J.M. Cabrera, J. Olivares, M. Carrascosa, et al. // Advances in Physics. – 1996. – V. 45. – I. 5. – P. 349-392.
7. Kong, Y. The site occupation of protons in lithium niobate crystals / Y. Kong, J. Xu, W. Zhang, G. Zhang // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2000. – V. 61. – I. 8. – P. 1331-1335.
8. Kovács, L. Hydroxyl ions in stoichiometric $LiNbO_3$ crystals doped with optical damage resistant ions / L. Kovács, Z. Szaller, K. Lengyel, G. Corradi // Optical Materials. – 2014. – V. 37. – P. 55-58.

9. **Черная, Т.С.** Пороговые концентрации в допированных цинком кристаллах ниобата лития и их структурная обусловленность / Т.С. Черная, Т.Р. Волк, И.А. Верин и др. // Кристаллография. – 2008. – Т. 53. – № 4. – С. 612-617.
10. **Palatnikov, M.N.** Concentration threshold effect on properties of zink-doped lithium niobate crystals / M. N. Palatnikov, N.V. Sidorov, D.V. Manukovskaya, et al // Journal of American ceramic society. – 2017. – V. 100. – I. 8. – P. 3703-3711.

References:

1. **Sidorov, N.V.** Niobat litiya: defekty, fotorefrakciya, kolebatel'nyj spektr, polyaritony / N.V. Sidorov, T.R. Volk, B.N. Mavrin, V.T. Kalinnikov. – M.: Nauka, 2003. – 255 p.
2. **Lengyel, K.** Growth, defect structure, and THz application of stoichiometric lithium niobate / K. Lengyel, A. Petér, L. Kovács, et al. // Applied Physics Reviews. – 2015. – V. 2. – I. 4. – P. 040601-1-040601-28.
3. **Masloboeva, S.M.** Metody polucheniya legirovannoj shihty niobata litiya dlya vyrashchivaniya monokristallov / S.M. Masloboeva, M.N. Palatnikov, L.G. Arutyunyan, D.V. Ivanenko // Izvestiya Sankt-Peterburgskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo instituta (tekhnicheskogo universiteta). – 2017. – no. 38 (64). – P. 34-43.
4. **Iyi, N.** Comparative study of defect structures in lithium niobate with different compositions / N. Iyi, K. Kitamura, F. Izumi, et al. // Journal of Solid State Chemistry. – 1992. – V. 101. – I. 2. – P. 340-352.
5. **Kong, Y.** OH^- absorption spectra of pure lithium niobate crystals / Y. Kong, Z. Wanlin, C. Xiaojun, et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1999. – V. 11. – № 9. – P. 2139-2145.
6. **Cabrera, J.M.** Hydrogen in lithium niobate / J.M. Cabrera, J. Olivares, M. Carrascosa, et al. // Advances in Physics. – 1996. – V. 45. – I. 5. – P. 349-392.
7. **Kong, Y.** The site occupation of protons in lithium niobate crystals / Y. Kong, J. Xu, W. Zhang, G. Zhang // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2000. – V. 61. – I. 8. – P. 1331-1335.
8. **Kovács, L.** Hydroxyl ions in stoichiometric $LiNbO_3$ crystals doped with optical damage resistant ions / L. Kovács, Z. Szaller, K. Lengyel, G. Corradi // Optical Materials. – 2014. – V. 37. – P. 55-58.
9. **Chernaya, T.S.** Porogovye koncentracii v dopirovannyh cinkom kristallah niobata litiya i ih strukturnaya obuslovlennost' / T.S. Chernaya, T.R. Volk, I.A. Verin i dr. // Kristallografiya. – 2008. – V. 53. – no. 4. – P. 612-617.
10. **Palatnikov, M.N.** Concentration threshold effect on properties of zink-doped lithium niobate crystals / M. N. Palatnikov, N.V. Sidorov, D.V. Manukovskaya, et al // Journal of American ceramic society. – 2017. – V. 100. – I. 8. – P. 3703-3711.

OBTAINING AND INVESTIGATION OF THE STRUCTURAL FEATURES OF THE $LiNbO_3 : Zn$ (2,12 wt. % Zn) SINGLE CRYSTAL

L.A. Bobreva¹, S. M. Masloboeva^{1,2}, N.V. Sidorov¹, M.N. Palatnikov¹

¹Tananaev Institute of Chemistry – Subdivision of the Federal Research Centre

«Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences»

²Apatity branch of Murmansk Arctic State University

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.124

Abstract. We carried out preparation of homogeneously doped charge $LiNbO_3 : Zn$

([Zn]=2,44 wt. %) of congruent composition (ratio $[Li]/[Nb]=0,96$). From this charge a $LiNbO_3:Zn$ ($Zn \sim 2,12$ wt. %) single crystal by the Czochralski method was grown. Defect complexes $(V_{Li})^- - OH^-$ of the $LiNbO_{3\text{cong}}$ and $LiNbO_3:Zn$ crystals were discovered by IR-absorption spectroscopy in the area of stretching vibrations of OH^- – groups.

Keywords: homogeneous doping, charge, single crystal, lithium niobate, stretching vibrations of OH^- – groups.

Бобрева Любовь Александровна – аспирант 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»

Маслобоева Софья Михайловна – к.т.н., доцент, 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», ведущий научный сотрудник, филиала ФГБОУ ВО «Мурманский арктический государственный университет» в г. Апатиты

Сидоров Николай Васильевич – д.ф.-м.н., профессор, и.о. главного научного сотрудника с исполнением обязанностей зав. 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 зав. 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»

Lubov' A. Bobreva – postgraduate student, Tananaev Institute of Chemistry – Subdivision of the Federal Research Centre «Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences»

Sofya M. Masloboeva – Ph. D., docent, Senior Researcher, Tananaev Institute of Chemistry – Subdivision of the Federal Research Centre «Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences», Leading Researcher, Apatity branch of Murmansk Arctic State University

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»