

## ОСОБЕННОСТИ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ $\text{LiNbO}_3:\text{B}$

Н.В. Сидоров, А.В. Кадетова, Р.А. Титов, Н.А. Теплякова, 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  
*r.titov@ksc.ru, n.tepliakova@ksc.ru*

DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.235

**Аннотация:** Методом рентгеноструктурного анализа исследованы особенности дефектной структуры номинально чистых кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{B}$ , выращенных методом Чохральского по технологии прямого твёрдофазного легирования шихты конгруэнтного состава ортоборной кислотой ( $\text{H}_3\text{BO}_3$ ). В работе обнаружено, что в кристаллах  $\text{LiNbO}_3:\text{B}$  длины связей  $\text{Me}-\text{O}$  ( $\text{Me}-\text{Li}$ ,  $\text{Nb}$ ) в кислородно-октаэдрических кластерах  $\text{MeO}_6$ , ответственных за сегнетоэлектрические и нелинейно оптические свойства кристалла, существенно отличаются от таковых для номинально чистого конгруэнтного кристалла ниобата лития  $\text{LiNbO}_{3\text{конг}}$ . Отличия в длинах связей обусловлены изменением свойств расплава, содержащего бор, технологическими параметрами роста кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{B}$  и локализацией следовых количеств бора в тетраэдрических пустотах структуры кристалла ниобата лития. Результаты исследования кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{B}$  сравниваются с таковыми для номинально чистых кристаллов  $\text{LiNbO}_{3\text{конг}}$  и  $\text{LiNbO}_{3\text{стех}}$  (5,5 мас.%  $\text{K}_2\text{O}$ ).

**Ключевые слова:** ниобат лития, кристалл, дефекты, прямое твердофазное легирование, рентгеноструктурный анализ

### 1. Введение

Монокристалл ниобата лития является одним из наиболее востребованных функциональных материалов электронной техники. Так, кристаллы ниобата лития находят широкое применение в качестве волноводов, оптических затворов, сред для голографической записи информации. Актуальным направлением является использование кристалла ниобата лития в преобразователях лазерного излучения [1-4]. Однако, несмотря на наличие несомненных преимуществ по сравнению с другими материалами, ниобат лития имеет и ряд качеств, существенно ограничивающих область его применения. Так, например, кристаллу ниобата лития свойственно наличие фоторефрактивного эффекта, заключающегося в изменении локального показателя преломления кристалла под действием лазерного излучения [1, 3, 5]. Это, в свою очередь, неизбежно приводит к деградации фронта проходящей через кристалл электромагнитной волны. Для снижения эффекта фоторефракции применяют легирование структуры кристалла катионами различных металлов с постоянной валентностью – магния, цинка, гадолиния и др. [1, 5]. Однако, большим недостатком легирования кристалла металлическими катионами является то, что существенное снижение эффекта

фоторефракции достигается только при высоких (несколько мас.%) концентрациях нефоторефрактивных катионов металлов, близких к пороговым значениям и выше их [1, 5]. Указанные особенности легирования приводят к сильному возрастанию композиционной неоднородности кристалла  $LiNbO_3$  (особенно вблизи концентрационных порогов) и к существенному снижению его оптического качества [1].

По этой причине актуальным является поиск альтернативных путей получения кристаллов  $LiNbO_3$  с низким эффектом фоторефракции. С этой точки зрения перспективен развиваемый в последние годы новый подход к получению оптически совершенных номинально чистых монокристаллов  $LiNbO_3$  для приложений в оптике, заключающийся в использовании в технологии кристаллов химически активного неметаллического элемента бора [6-9]. Такой подход перспективен для получения крупногабаритных оптически совершенных кристаллов  $LiNbO_3$  с составами, близкими к стехиометрическому ( $Li/Nb \approx 1$ ), характеризующихся постоянным показателем преломления вдоль оси роста.

## 2. Постановка задачи

Целью работы было исследовать особенности дефектной структуры монокристаллов  $LiNbO_3:B$  (1 и 2), полученных по технологии прямого твёрдофазного легирования шихты конгруэнтного состава ортоборной кислотой  $H_3BO_3$  при разных условиях роста, см. Таблицу 1 [10]. Методика синтеза подробно представлена в работе [10]. Результаты сравнивались с результатами, полученными для номинально чистых кристаллов конгруэнтного ( $LiNbO_{3\text{ конг}}$ ) и близкого к стехиометрическому ( $LiNbO_{3\text{ стех}}$  (5,5 мас.%  $K_2O$ )) составов.

Таблица 1. Расчётная концентрация бора (мас.%) в шихте, температурный градиент (град/мм), скорость роста (мм/ч) и концентрация бора (мас.%) в кристаллах  $LiNbO_3:B$ .

№ кристалла	Расчётная концентрация бора в шихте, мас. %	Температурный градиент, град/мм	Скорость роста, мм/ч	[B] в конусе, мас.%
1	0,25	3	0,63	$1 \cdot 10^{-5}$
2		< 2	0,78	$144 \cdot 10^{-5}$

Концентрация примесных металлических элементов во всех исследованных кристаллах, определенная спектральным и масс-спектральным методами анализа, не превышала  $5 \cdot 10^{-4} - 10^{-3}$  мас.% [7-9]. Рентгенограммы порошковых образцов кристаллов регистрировались на дифрактометре ДРОН-6. В областях отражений рентгенограммы снимались более детально с шагом  $0,02^\circ$ , а в областях фона – с шагом  $0,2^\circ$ .

Точность определения интенсивности в каждой точке дифракционной линии составляла не менее 2%.

### 3. Результаты и обсуждение

Рентгенограммы порошковых образцов кристаллов  $LiNbO_3$  конг,  $LiNbO_3$  стех (5,5 мас.%  $K_2O$ ) и  $LiNbO_3:B$  (1 и 2) качественно подобны и соответствуют рентгенограмме ниобата лития с пространственной группой симметрии  $R3c$  с двумя формульными единицами в элементарной ячейке. Из Таблицы 2 видно, что значения периодов элементарной ячейки в кристалле  $LiNbO_3:B$  (1) близки к соответствующим значениям для стехиометрического кристалла  $LiNbO_3$  стех (5,5 мас.%  $K_2O$ ).

Таблица 2. Периоды  $a$  и  $c$  элементарной ячейки, значения координат атомов ( $x/a$ ,  $y/b$ ,  $z/c$ ) и коэффициентов заполнения позиций ( $G$ ) в кристаллах  $LiNbO_3$  стех (5,5 мас.%  $K_2O$ ),  $LiNbO_3$  конг и  $LiNbO_3:B$  (1 и 2).

	$G$	$x/a$	$y/b$	$z/c$		$G$	$x/a$	$y/b$	$z/c$
$LiNbO_3:B$ (1) ( $R_{wp}$ (%) = 9,87, $R_p$ (%) = 7,95) $a = 5,1478 \text{ \AA}$ , $c = 13,8597 \text{ \AA}$					$LiNbO_3:B$ (2) ( $R_{wp}$ (%) = 5,24, $R_p$ (%) = 11,49) $a = 5,1543 \text{ \AA}$ , $c = 13,8754 \text{ \AA}$				
$Nb$	0,94	0	0	0	$Nb$	0,96	0	0	0
$O$	1,00	0,0566	0,3431	0,064	$O$	1,00	0,069	0,3682	0,0652
$Li$	0,98	0	0	0,281	$Li$	0,95	0	0	0,2798
$Nb_{Li}^*$	0,017	0	0	0,300	$Nb_{Li}^*$	–	–	–	–
$Nb_{okt}^{**}$	0,018	0	0	0,1478	$Nb_{okt}^{**}$	0,028	0	0	0,111
$LiNbO_3$ конг ( $R_{wp}$ (%) = 15,16, $R_p$ (%) = 12,31) $a = 5,1489 \text{ \AA}$ , $c = 13,8631 \text{ \AA}$					$LiNbO_3$ стех (5,5 мас.% $K_2O$ ) ( $R_{wp}$ (%) = 9,55, $R_p$ (%) = 7,96) $a = 5,1429 \text{ \AA}$ , $c = 13,8447 \text{ \AA}$				
$Nb$	0,92	0	0	0	$Nb$	0,986	0	0	0
$O$	1,00	0,065	0,328	0,0639	$O$	1,00	0,0640	0,3390	0,0650
$Li$	0,98	0	0	0,2790	$Li$	0,989	0	0	0,2816
$Nb_{Li}^*$	0,02	0	0	0,2700	$Nb_{Li}^*$	0,004	0	0	0,2790
$Nb_{okt}^{**}$	0,025	0	0	0,1100	$Nb_{okt}^{**}$	–	–	–	–

\* – катион ниобия в положении катиона лития.

\*\* – катион ниобия в вакантном кислородном октаэдре.

Структурные параметры кристаллов  $LiNbO_3:B$  (1 и 2), характеризующие распределение катионов по кислородным октаэдрам  $O_6$ , приведены в Таблице 2. Из Таблицы 2 видно, что в кристаллах  $LiNbO_3:B$  имеются точечные дефекты  $Nb_{Li}$  и  $Nb_{okt}$ . Причем в кристалле  $LiNbO_3:B$  (2)

дефектов  $Nb_{Li}$  не обнаружено. Необходимо отметить, что дефекты  $Nb_{Li}$  являются глубокими электронными ловушками, существенно влияющими на фоторефрактивные и люминесцентные свойства ниобата лития [1, 3, 5].

Для кристаллов  $LiNbO_3:B$  (1 и 2), выращенных из шихты с одинаковой концентрацией бора но при разных технологических параметрах роста (см. Таблицу 1), относительно кристалла стехиометрического состава, различия между значениями периодов элементарной ячейки составляют: для  $a$  – 0,0049 и 0,0114 Å, для  $c$  – 0,0150 и 0,0307 Å, соответственно.

Кроме того, точечные дефекты  $Nb_{Li}$ ,  $Nb_{окт}$  и др. изменяют порядок чередования основных катионов вдоль полярной оси кристалла, что влияет на величину спонтанной поляризации и сегнетоэлектрические свойства кристалла  $LiNbO_3$ . Расчет отношения  $Li/Nb$  кристаллов  $LiNbO_3:B$  (1 и 2) на основе данных, представленных в Таблице 2, показал, что для кристалла  $LiNbO_3:B$  (1)  $Li/Nb \approx 1$ , а для кристалла  $LiNbO_3:B$  (2)  $Li/Nb \approx 0,96$ . Полученные данные свидетельствуют о том, что кристалл  $LiNbO_3:B$  (1) по своему составу более близок к стехиометрическому, чем кристалл  $LiNbO_3:B$  (2). Более того, значения периодов элементарной ячейки кристалла  $LiNbO_3:B$  (2) наиболее сильно отличаются от соответствующих значений периодов кристалла  $LiNbO_{3\text{стех}}$  (5,5 мас.%  $K_2O$ ), по сравнению с кристаллом  $LiNbO_3:B$  (1), что можно объяснить большей концентрацией катионов бора в кристалле  $LiNbO_3:B$  (2) и иными технологическими параметрами его роста (см. Таблицу 1).

Из уточненных значений координат атомов и периодов элементарной ячейки нами были рассчитаны расстояния металл-кислород ( $Me-O$ ) в кластерах  $MeO_6$ , а также расстояния металл-металл ( $Me-Me$ ) вдоль полярной оси кристалла ( $Z$ ). Данные приведены в Таблице 3. Из Таблицы 3 видно, что значения длинных и коротких расстояний в кластерах основного мотива ( $LiO_6$  и  $NbO_6$ ) в кристалле  $LiNbO_3:B$  (1) в большей степени приближены к соответствующим расстояниям в кристалле  $LiNbO_{3\text{стех}}$  (5,5 мас.%  $K_2O$ ), по сравнению с кристаллом  $LiNbO_3:B$  (2). Однако, вблизи дефекта  $Nb_{Li}$  в кристалле  $LiNbO_3:B$  (1) расстояния  $Me-O$  вдоль полярной оси отличаются от соответствующих расстояний в кристалле  $LiNbO_{3\text{стех}}$  (5,5 мас.%  $K_2O$ ), см. Таблицу 3. Важно отметить, что в кристалле  $LiNbO_3:B$  (2), согласно полученным данным рентгеноструктурного анализа (см. Таблицу 2), отсутствуют дефекты  $Nb_{Li}$ . Это может быть связано с большей концентрацией катионов бора в кристалле  $LiNbO_3:B$  (2) по

сравнению с кристаллом  $LiNbO_3 : B$  (1) (см. Таблицу 1), что предотвращает образование дефектов  $Nb_{Li}$  и хорошо согласуется с результатами модельных расчётов, представленных в работе [7].

Таблица 3. Рассчитанные межатомные расстояния для кристаллов  $LiNbO_3$  стех (5,5 мас.%  $K_2O$ ) и  $LiNbO_3 : B$  (1 и 2).

Пары атомов	$LiNbO_3$ стех (5,5 мас.% $K_2O$ )	$LiNbO_3 : B$ (1)	$LiNbO_3 : B$ (2)
Расстояния $Nb-O$ в октаэдрах $NbO_6$ основного мотива			
$Nb-O$	2,096	2,111	2,029
$Nb-O$	1,842	1,865	1,966
Расстояния $Li-O$ в октаэдрах $LiO_6$ основного мотива			
$Li-O$	2,247	2,242	2,199
$Li-O$	2,142	2,102	2,099
Расстояния $Nb_{Li}-O$ в октаэдрах $Nb_{Li}O_6$			
$Nb_{Li}-O$	2,267(3)	2,203	-
$Nb_{Li}-O$	2,133(1)	2,064	-
Расстояния $Me-Me$ в области основного мотива вдоль полярной оси $Nb-Li$ , $Li-Nb'$			
$Nb-Li$	3,899(1)	3,896	3,881
$Li-Nb'$	3,024(7)	3,034	3,057

Малый коэффициент вхождения бора ( $K_p \ll 1$ ) в структуру кристалла  $LiNbO_3$  [7] свидетельствует о том, что большая часть бора, находящегося в шихте, идет на образование в расплаве ниобата лития электрохимически активных комплексов разного состава, изменяющих структуру, свойства расплава и условия его кристаллизации. В работе [7] модельными расчетами показано, что элемент  $B^{3+}$  может локализоваться в тетраэдрических  $O_4$  пустотах структуры кристалла  $LiNbO_3$ . При этом «буферные» тетраэдрические пустоты  $O_4$  кристалла способны принять определенное количество катионов бора, составляющее по данным масс-спектрального анализа  $\approx 10^{-4}$  мас.% [7]. Для соблюдения принципа сохранения зарядовой нейтральности кристалла  $LiNbO_3$  локализация катионов бора в тетраэдрических пустотах  $O_4$  должна приводить к уменьшению концентрации точечных дефектов катионной подрешетки, то есть к общему повышению структурного совершенства и оптического качества кристалла. Указанные факты также косвенно можно объяснить отличием длин связей ( $Me-O$ ,  $Me-Me$ ) и параметров элементарной ячейки номинально чистых кристаллов  $LiNbO_3 : B$  и номинально чистых

кристаллов  $LiNbO_3$ <sub>стех</sub> (5,5 мас.%  $K_2O$ ) и  $LiNbO_3$ <sub>конг</sub>, полученных в данной работе методом рентгеноструктурного анализа.

#### 4. Заключение

Методом рентгеноструктурного анализа было показано, что в кристаллах  $LiNbO_3:B$  изменяются длины связей  $Me-O$  в кислородно-октаэдрических кластерах  $MeO_6$  и длины связей  $Me-Me$  вдоль полярной оси, которые участвуют в формировании сегнетоэлектрических и нелинейно-оптических свойств кристаллов  $LiNbO_3$ . Было показано, что на степень деформации кислородных октаэдров  $NbO_6$ ,  $LiO_6$ ,  $Nb_{Li}O_6$ , на концентрацию собственных дефектов, а также на величину стехиометрии влияют не только технологические параметры роста кристаллов, но и незначительная концентрация бора ( $1 \cdot 10^{-5}$  и  $144 \cdot 10^{-5}$  мас.%) в кристалле. Установлено, что использование борсодержащей шихты ниобата лития конгруэнтного состава позволяет получить кристаллы, по составу близкие к стехиометрическому, обладающие пониженной концентрацией точечных структурных дефектов ( $Nb_{Li}, V_{Li}$ ) и многозарядных катионов переходных металлов, являющихся глубокими ловушками электронов, ответственными за эффект фоторефракции. Структурные исследования показали, что кристалл  $LiNbO_3:B$  (1) по своему составу более близок к стехиометрическому, чем кристалл  $LiNbO_3:B$  (2). Обнаружено, что с повышением концентрации точечных дефектов  $Nb_{Li}$  в кристалле  $LiNbO_3:B$  (1), по сравнению с кристаллом  $LiNbO_3$ <sub>стех</sub> (5,5 мас.%  $K_2O$ ), происходит заметное смещение ионов ниобия вдоль полярной оси от центра октаэдров  $O_6$ , что повышает величину спонтанной поляризации кристалла  $LiNbO_3:B$  и объясняет увеличение температуры Кюри и температуры плавления кристаллов  $LiNbO_3:B$ , обнаруженные в работе [7].

#### 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. Кузьминов, Ю.С. Электрооптический и нелинейнооптический кристалл ниобата лития / Ю.С. Кузьминов. – М.: Наука, 1987. – 264 с.
3. Photorefractive materials and their applications 1; ed by. P. Gunter, J.-P. Huignard. – New York: Springer, 2006. – XIV, 426 p. DOI: 10.1007/b106782.
4. Lehnert, H. A neutron powder investigation of the high-temperature structure and phase transition in stoichiometric  $LiNbO_3$  / H. Lehnert, H. Boysen, F. Frey, A.W. Hewat, P. Radaelli // Crystalline Materials. – 1997. – V. 212. – I 10. – P. 712-719. DOI: 10.1524/zkri.1997.212.10.712.
5. Volk, T. Lithium niobate. Defects, photorefractive and ferroelectric switching / T. Volk, M. Wohlecke. – Berlin: Springer, 2008. – 250 p. DOI: 10.1007/978-3-540-70766-0.
6. Can, H. Subsolidus phase relations and the crystallization region of  $LiNbO_3$  in the system  $Li_2O-B_2O_3-Nb_2O_5$  / H. Can, W. Shichao, Y. Ning // Journal of Alloys and Compounds. – 2010. – V. 502. – I. 1. – P. 211-214. DOI:

10.1016/j.jallcom.2010.04.146.

7. Sidorov, N.V. Boron influence on defect structure and properties of lithium niobate crystals / N.V. Sidorov, N.A. Teplyakova, O.V. Makarova et al. // *Crystals*. – 2021. – V. 11. – I. 5. – Art. № 458. – 37 p. DOI: 10.3390/cryst11050458.

8. Маслобоева, С.М. Синтез и исследование фазового состава твердых прекурсоров  $Nb_2O_5(B)$  и шихты  $LiNbO_3(B)$  / С.М. Маслобоева, Г.И. Кадырова, Л.Г. Арутюнян // *Журнал неорганической химии*. – 2016. – Т. 61. – № 4. – С. 433-440. DOI: 10.7868/S0044457X16040140.

9. Елизарова, И.Р. Исследование состава и однородности твердых прекурсоров  $Nb_2O_5(B)$  и шихты  $LiNbO_3(B)$  / И.Р. Елизарова, С.М. Маслобоева // *Журнал неорганической химии*. – 2018. – Т. 63. – № 2. – С. 227-232. DOI: 10.7868/S0044457X18020149.

10. Палатников, М.Н. Получение и свойства кристаллов ниобата лития, выращенных из расплавов конгруэнтного состава, легированных бором / М.Н. Палатников, И.В. Бирюкова, О.В. Макарова и др. // *Труды Кольского научного центра РАН. Химия и материаловедение. Спецвыпуск*. – 2015. – № 5(31). – С. 434-438.

#### References:

1. Sidorov N.V., Volk T.P., Mavrin B.N., Kalinnikov V.T. *Niobat litiya: defekty, fotorefraktsiya, kolebatel'nyi spektr, polyaritony* [Lithium niobate: defects, photorefraction, vibrational spectrum, polaritons]. Moscow, Nauka Publ., 2003, 255 p. (In Russian).

2. Kuz'minov Yu.S. *Elektroopticheskij i nelinejnoopticheskij kristall niobata litiya* [Electro-optical and nonlinear-optical crystal of lithium niobate]. Moscow, Nauka Publ., 1987, 264 p. (In Russian).

3. Photorefractive materials and their applications 1, ed by. P. Gunter, J.-P. Huignard. New York, Springer, 2006, XIV, 426 p. DOI: 10.1007/b106782.

4. Lehnert H., Boysen H., Frey F., Hewat A.W., Radaelli P. A neutron powder investigation of the high-temperature structure and phase transition in stoichiometric  $LiNbO_3$ , *Crystalline Materials*, 1997, vol. 212, issue 10, pp. 712-719. DOI: 10.1524/zkri.1997.212.10.712.

5. Volk T., Wohlecke M. *Lithium niobate. Defects, photorefraction and ferroelectric switching*. Berlin, Springer, 2008, 250 p. DOI: 10.1007/978-3-540-70766-0.

6. Can H., Shichao W., Ning Y. Subsolidus phase relations and the crystallization region of  $LiNbO_3$  in the system  $Li_2O-B_2O_3-Nb_2O_5$ , *Journal of Alloys and Compounds*, 2010, vol. 502, issue 1, pp. 211-214. DOI: 10.1016/j.jallcom.2010.04.146.

7. Sidorov N.V., Teplyakova N.A., Makarova O.V. et al. Boron influence on defect structure and properties of lithium niobate crystals, *Crystals*, 2021, vol. 11, issue 5, art. no. 458, 37 p. DOI: 10.3390/cryst11050458.

8. Masloboeva S.M., Kadyrova G.I., Arutyunyan L.G. Synthesis of  $Nb_2O_5(B)$  solid precursors and  $LiNbO_3(B)$  batches and their phase compositions, *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2016, vol. 61, issue 4, pp. 412-419. DOI: 10.1134/S0036023616040148.

9. Elizarova I.R., Masloboeva S.M. Composition and homogeneity of  $Nb_2O_5(B)$  solid precursors and  $LiNbO_3(B)$  batches, *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2018, vol. 63, issue 2, pp. 239-244. DOI: 10.1134/S0036023618020055.

10. Palatnikov M.N., Biryukova I.V., Makarova O.V. et al. Poluchenie i svojstva kristallov niobata litiya, vyrashchennykh iz rasplavov kongruentnogo sostava, legirovannykh borom [Preparation and properties of lithium niobate crystals grown from melts of congruent composition doped with boron], *Trudy Kol'skogo nauchnogo tsentra RAN. Khimiya i materialovedenie. Spetsvyпуск* [Proceedings of the Kola Scientific Center of the Russian Academy of Sciences. Chemistry and materials science. Special issue], 2015, no. 5(31), pp. 434-438. (In Russian).

*Original paper*

#### SPECIFIC FEATURES OF THE DEFECT STRUCTURE OF $LiNbO_3:B$ CRYSTALS

N.V. Sidorov, A.V. Kadetova, R.A. Titov, N.A. Teplyakova, 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/2022.14.235

**Abstract:** Specific features of the defect structure of nominally pure  $LiNbO_3:B$  crystals were studied by the X-ray diffraction analysis. Nominally pure  $LiNbO_3:B$  crystals were grown by Czochralski using the technology of the direct solid-phase doping of the congruent charge by orthoboric acid ( $H_3BO_3$ ).

The bonds lengths of  $Me-O$  in  $MeO_6$  clusters ( $Me-Li, Nb$ ) determine the ferroelectric and nonlinear optical properties of the lithium niobate crystal. The values of these bonds in  $LiNbO_3:B$  crystals differ significantly from the bonds lengths of the nominally pure congruent crystal  $LiNbO_{3cong}$ . The differences in the bonds lengths are caused by a change in the properties of the boron-containing melt, technological parameters of the growth of  $LiNbO_3:B$  crystals, and the localization of a trace amounts of boron in tetrahedral voids of the lithium niobate crystal structure. The results of the study of  $LiNbO_3:B$  crystals were compared with those for nominally pure  $LiNbO_{3cong}$  crystals and near-stoichiometric  $LiNbO_{3stoich}$  (5,5 wt%  $K_2O$ ) ones.

*Keywords: lithium niobate, crystal, defects, direct solid-phase doping, X-ray diffraction analysis.*

*Сидоров Николай Васильевич – д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник 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»*

*Кадетова Александра Владимировна – 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»*

*Титов Роман Алексеевич – младший научный сотрудник сектора 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»*

*Теплякова Наталья Александровна – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник сектора 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., главный научный сотрудник 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»*

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

*Alexandra V. Kadetova – postgraduate student, Tananaev Institute of Chemistry – Subdivision of the Federal Research Centre «Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences»*

*Roman A. Titov – Junior Researcher, Vibrational Spectroscopy Sector of the Electronic Engineering Materials Laboratory, Tananaev Institute of Chemistry – Subdivision of the Federal Research Centre «Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences»*

*Natalya A. Teplyakova – Ph. D., Senior Researcher, Vibrational Spectroscopy Sector of the Electronic Engineering Materials 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., Chief Researcher and as Head of the Electronic Engineering Materials Laboratory, Tananaev Institute of Chemistry – Subdivision of the Federal Research Centre «Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences»*

Поступила в редакцию/received: 06.08.2022; после рецензирования/revise: 07.09.2022; принята/accepted 10.09.2022.