

УДК 539.23

DOI: 10.17223/00213411/63/11/115

Т.Т. МАГКОЕВ

**ВЛИЯНИЕ ТОЛЩИНЫ ПЛЕНКИ НИКЕЛЯ НА ПОВЕРХНОСТИ W(110)  
НА ХАРАКТЕР АДсорбЦИИ МОЛЕКУЛ ОКСИДА АЗОТА \***

Методом инфракрасной абсорбционной спектроскопии исследована адсорбция молекул оксида азота NO на поверхности упорядоченных плёнок никеля толщиной в один, два и три моноатомных слоя, осаждённых на W(110). При всех толщинах структура плёнки соответствует грани (111) кристалла никеля. ИК-спектры NO на поверхности плёнок и на грани массивного кристалла Ni(111) соответствуют друг другу при толщине плёнки никеля в три монослоя. При меньших толщинах наблюдаются наиболее явные различия при монослойном покрытии Ni. Это обусловлено дополнительным влиянием поля W(110) на величину внутримолекулярной связи в NO и/или некоторым искажением структуры (111) монослойной плёнки Ni по сравнению с кристаллом Ni(111) за счёт потенциального рельефа подложки и, следовательно, изменением геометрии адсорбции и электронного состояния молекул NO.

*Ключевые слова:* тонкие пленки, адсорбция, никель, оксид азота, методы анализа поверхности.

Одним из важных вопросов физики поверхности и тонких плёнок является вопрос о том, какова минимальная толщина адсорбированной на поверхности твёрдого тела плёнки, при которой свойства этой плёнки близки к свойствам соответствующего массивного материала [1]. Для ответа на этот вопрос воспользуемся обстоятельством, что частоты внутримолекулярных колебаний адсорбированных молекул, в частности NO и CO, чрезвычайно чувствительны к электронному состоянию подложки, и возьмём эти молекулы в качестве тестовых [2]. Помимо использования в роли тестовых частиц, изучение взаимодействия молекул газов с поверхностью твёрдых тел представляет и самостоятельный интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Интерес к исследованию адсорбции газов особенно возрос в последние годы после серии работ по фотостимулированным процессам на поверхности, продемонстрировавшим, что фотохимия молекул на поверхности гораздо более разнообразна, чем в газовой фазе [3]. Кроме того, появилась возможность изучения динамики адсорбции, десорбции, диссоциации, рекомбинации, поверхностных химических реакций в масштабе времени элементарных электронных переходов (до  $10^{-15}$  с) с применением лазерных импульсов пико- и фемтосекундной длительности [4, 5]. В большинстве случаев характер фотопроцесса в системе молекула – металл обусловлен электронным переходом в зоне проводимости металла, возбуждаемым световым импульсом [4, 6], что указывает на важную роль электронной структуры подложки. Кроме того, эти процессы чрезвычайно чувствительны к начальному состоянию молекул на поверхности. Так, молекула NO на Pt(111), расположенная непосредственно над атомом Pt, десорбируется под воздействием лазерных импульсов, в то время как молекула, расположенная между двумя атомами Pt по мостиковой схеме, диссоциирует [7]. Сплавление Pt с небольшим количеством (10 %) Ge существенно меняет динамику поведения NO [8]. В связи с этим для более полного понимания динамики поверхностных процессов необходимо знать электронную структуру подложки и начальное состояние системы молекула – металл.

Цель настоящей работы – исследовать состояние системы, образующейся при адсорбции NO на плёнках никеля разных толщин, осаждённых на W(110). Такое исследование, с одной стороны, позволит определить минимальную толщину плёнки Ni, имеющей свойства массивного кристалла никеля, с другой – состояние NO на плёнках разных толщин. Использование сочетания Ni–W представляется заслуживающим внимания, поскольку адсорбция NO на W является диссоциативной, а на Ni – молекулярной, в связи с этим интересно проследить адсорбцию NO на промежуточном типе подложки, Ni/W(110).

**Методы исследований**

Исследование проводилось в сверхвысоковакуумной камере ( $P = 10^{-10}$  Торр) методами отражательной инфракрасной абсорбционной спектроскопии (ОИКАС), электронной оже-спектроскопии (ЭОС), дифракции медленных электронов (ДМЭ) и контактной разности потенциалов (КРП).

\* Работа выполнена в рамках проекта по соглашению № 075-15-2019-1887 с Минобрнауки РФ.

ОИКАС является высокочувствительным неразрушающим методом анализа, который идеально подходит для исследования систем рассматриваемого типа, т.е. молекулы газа на поверхности металла. В работе использован ИК-спектрометр фирмы «Nicolet», монохроматорная и детекторная части которого размещены относительно образца так, как показано на рис. 1, а. Линейно поляризованное ИК-излучение проникает в вакуумную камеру через окно из  $\text{CaF}_2$  и падает на образец под углом  $80^\circ$ . Отражённый свет выходит из камеры и регистрируется ИК-детектором, изготовленным из кристалла  $\text{HgCdTe}$ . Использование скользящего угла падения луча на поверхность обусловлено тем, что суперпозиция полей падающего и отражённого лучей, направленная перпендикулярно поверхности, увеличивается с ростом угла падения. Это позволяет получить максимальный сигнал ИК-поглощения, поскольку молекулярная ось адсорбированных молекул  $\text{NO}$  направлена вдоль нормали к поверхности  $\text{Ni}(111)$  (рис. 1, б) [9]. Сканирование волновых чисел ИК-излучения проводилось в интервале  $400\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ . Разрешение прибора составляло  $2\text{ см}^{-1}$ . В указанном интервале не наблюдалось никаких других линий поглощения за исключением тех, которые приведены в работе.

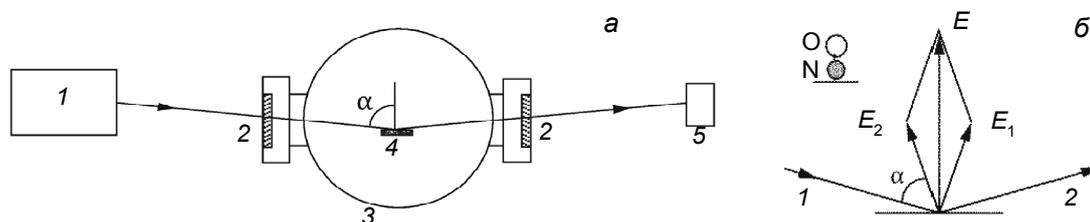


Рис. 1. Схематическое изображение геометрии ОИКАС (а): 1 – ИК-монохроматор; 2 – окна из  $\text{CaF}_2$ ; 3 – вакуумная камера; 4 – образец; 5 – ИК-детектор. Электрические векторы падающего (1) и отражённого (2) лучей  $E_1$  и  $E_2$  и суммарный вектор  $E$  на поверхности образца (б). Величина вектора  $E$  увеличивается с ростом угла падения  $\alpha$ .

При адсорбции  $\text{Ni}$  на  $\text{W}(110)$  уже при монослойном покрытии образуется структура, соответствующая  $\text{Ni}(111)$  [10, 11]. Поэтому для того, чтобы иметь возможность сравнить спектры  $\text{NO}$  на поверхности плёнки  $\text{Ni}$  и массивного кристалла, полученные в одинаковых экспериментальных условиях, на держателе образца наряду с  $\text{W}(110)$  размещался и кристалл  $\text{Ni}(111)$ . Кристаллы  $\text{W}(110)$  и  $\text{Ni}(111)$  имели соответственно эллиптическую ( $11 \times 7 \times 0.7$  мм) и круговую ( $9 \times 0.7$  мм) формы. Очистка кристалла  $\text{W}(110)$  происходила по стандартной схеме: травление ионами аргона, отжиг при температуре 1300 К в атмосфере кислорода, кратковременные (в течение 1 мин) высокотемпературные вспышки при 2600 К. Поверхность  $\text{Ni}(111)$  после ионного травления отжигалась при 900 К последовательно в атмосфере кислорода и водорода с дальнейшим кратковременным прогревом при 1300 К. После каждого измерения поверхность  $\text{W}(110)$  очищалась высокотемпературной вспышкой, а кристалла  $\text{Ni}(111)$  – отжигом в атмосфере водорода с последующей вспышкой при 1300 К. Плёнки  $\text{Ni}$  на  $\text{W}(110)$  формировались термическим напылением с использованием источников классом очистки 99.999%. Кристаллы  $\text{W}(110)$  и  $\text{Ni}(111)$  были соединены с помощью танталовых проводов (0.35 мм) и танталовых полосок с медным резервуаром, наполняемым жидким азотом, что позволяло охлаждать образцы до 110 К. Адсорбция  $\text{NO}$  производилась путём напуска в камеру газообразного  $\text{NO}$  чистотой 99.999% через регулируемый высоковакуумный клапан. Температура образцов во время напуска  $\text{NO}$  и во время измерений методом ОИКАС составляла 110 К.

### Результаты и их обсуждение

Несмотря на то, что адсорбция атомов  $\text{Ni}$  на поверхности  $\text{W}(110)$  изучена достаточно подробно [10, 11], целесообразно провести в настоящей работе исследование свойств системы  $\text{Ni}/\text{W}(110)$ , прежде чем приступить к изучению  $\text{NO}/\text{Ni}/\text{W}(110)$ . Для этой цели использовались методы ЭОС, ДМЭ и КРП. При нанесении  $\text{Ni}$  на поверхность  $\text{W}(110)$  при комнатной температуре появлялись размытые сверхструктурные рефлексы ДМЭ низкой интенсивности. Адсорбция на подогретой до 500 К подложке приводила к повышению резкости и интенсивности сверхструктурных рефлексов. При более высокой температуре подложки (до 750 К) дифракционная картина не претерпевала заметных изменений. В связи с этим исследовались свойства системы  $\text{Ni}/\text{W}(110)$ , образующейся

при адсорбции Ni на подогретой до 500 К подложке. Измерения проводились при выключенном прогреве. При повышении покрытия Ni форма оже-пиков подложки и адсорбата и их энергетические положения не претерпевают заметных изменений. Интенсивность оже-сигнала адсорбата растёт, подложки – уменьшается. Зависимости интенсивностей  $I$  пика LVV (850 эВ) оже-линии Ni и LMM (165 эВ) линии W и работы выхода  $\phi$  от покрытия  $\theta$  атомов Ni приведены на рис. 2. Наличие изломов на зависимостях  $I(\theta)$  коррелирует с выходом работы на насыщение. Такое поведение свидетельствует о том, что реализуется послойный механизм роста плёнки Ni на поверхности W(110) с образованием сверхструктуры плёнки при монослойном покрытии, соответствующей Ni(111). Стабилизация работы выхода при монослойном покрытии и формирование плотноупакованных структур (100) и (111) наблюдается и при адсорбции других 3d-металлов, Ti, Cr, Cu [12]. С ростом покрытия свыше четырёх монослоёв Ni сверхструктура Ni(111) сохраняется. При больших толщинах плёнки измерения не проводились. Стабилизация работы выхода, а также формирование плотности состояний в валентной зоне и коллективных мод при формировании монослоя [10, 11] позволяет заключить, что свойства монослойной плёнки Ni на поверхности W(110) близки свойствам массивного материала. Такая ситуация характерна для случая адсорбции атомов металлов на поверхности металлических подложек [13, 14].

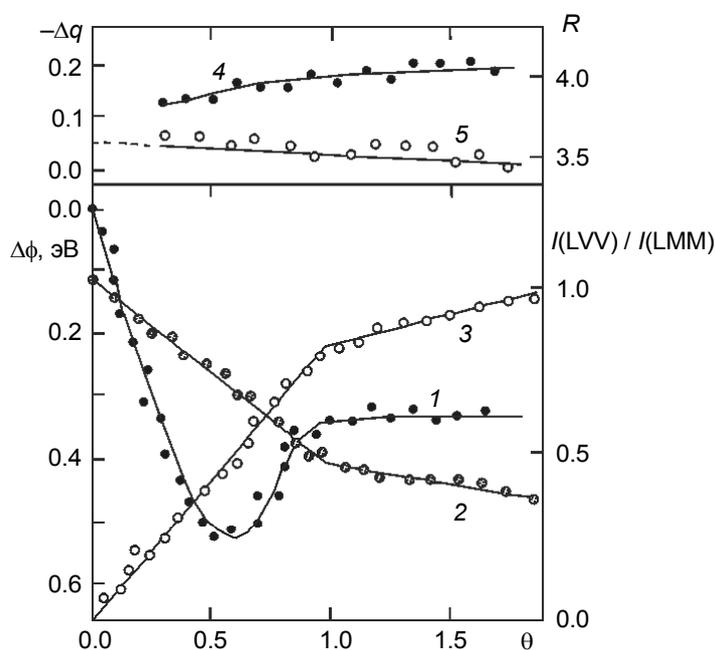


Рис. 2. Зависимость работы выхода (кр. 1), интенсивностей оже-пиков W (кр. 2) и Ni (кр. 3), отношения интенсивностей оже-линий Ni  $I(LVV)/I(LMM)$  ( $R$ ) (кр. 4) и заряда адатомов ( $\Delta q$ ) (кр. 5) от покрытия при адсорбции атомов Ni на поверхности W(110), поддерживаемой при температуре 500 К. Единичному покрытию соответствует значение поверхностной концентрации  $1.7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$

Как видно из хода зависимости работы выхода  $\phi$  от покрытия (рис. 2, кривая 1), Ni является электроположительным адсорбатом, т.е. при адсорбции происходит перенос электронного заряда от Ni к W(110). Величина начального дипольного момента связи адатом – подложка, оцененная из наклона зависимости  $\phi(n)$  при  $n \rightarrow 0$ , составляет 0.15 D. Помимо дипольного момента, интересно оценить величину электронного заряда адатома Ni. Для этой цели можно воспользоваться способом, предложенным ранее в [15] и основанным на данных, получаемых с помощью ЭОС. Этот способ базируется на том, что вероятность оже-переходов с участием валентных электронов пропорциональна величине заряда на валентном уровне эмитирующего атома. С использованием ЭОС высокого разрешения Аллен с соавт. [16] показали, что для отношения интенсивностей LVV и LMM оже-переходов 3d-металлов от Sc до Cu выполняется следующее соотношение:

$$R = I(LVV)/I(LMM) = Cq(q-1), \quad (1)$$

где  $q$  – количество валентных электронов в атомах металлических кристаллов;  $C$  – константа. При адсорбции атомов этих металлов на поверхности твёрдого тела величина заряда на валентных уровнях изменяется вследствие образования хемосорбционных связей с подложкой. Если адатом на поверхности приобретает избыточный заряд  $\Delta q$  (в единицах заряда электрона), то соотношение (1) переписывается в виде

$$R = C(q + \Delta q)(q + \Delta q - 1). \quad (2)$$

В общем случае знак  $\Delta q$  может быть как положительным, так и отрицательным в зависимости от того, является ли адсорбат электроположительным или электроотрицательным. Зависимость величины  $R$  для Ni от покрытия приведена на рис. 2, кривая 4. При  $\theta > 2$ , когда зависимость  $R(\theta)$  стабилизируется, предполагалось, что  $\Delta q = 0$ . Это позволило определить величину  $C$ , после чего строилась зависимость  $\Delta q(\theta)$  (рис. 2, кривая 5). Знак « $\leftarrow$ » указывает на то, что адатомы являются электроположительными по отношению к подложке, что согласуется с направлением изменения работы выхода (рис. 2, кривая 1). Зависимость  $\Delta q(\theta)$  указывает на то, что заряд адатомов с ростом покрытия уменьшается, что обусловлено переходом электронной плотности от поляризованных в сторону W связей адатом – подложка на латеральные связи между адатомами. При покрытии, превышающем монослойное, адатомы Ni электронейтральны. Экстраполяция  $\Delta q(\theta)$  к нулевому покрытию позволяет оценить величину заряда одиночного адатома Ni на W(110), которая составляет 0.06 (в единицах заряда электрона).

На рис. 3 приведены ИК-спектры поглощения для системы NO/Ni/W(110) для плёнок никеля ориентацией (111) толщиной в один, два и три монослоя. Спектры 1–4 соответствуют адсорбции на моноатомной плёнке при разных экспозициях NO. При экспозиции в 0.6 L ( $1 \text{ L} = 10^{-6} \text{ Торр} \cdot \text{с}$ ) наблюдаются две линии поглощения при волновых числах  $\nu = 1436$  и  $1533 \text{ см}^{-1}$ . Низкочастотная линия обусловлена молекулами NO, адсорбированными на границах соединения структур ( $8 \times 1$ ), из которых состоит монослойная плёнка Ni на поверхности W(110) [10]. С ростом дозы NO обе линии смещаются в сторону больших значений волновых чисел с одновременным их сближением друг к другу. При насыщающем покрытии (экспозиция 3 L) спектр состоит из двух разных по интенсивности линий поглощения при  $1507$  и  $1574 \text{ см}^{-1}$ . С ростом экспозиции NO спектр не претерпевает заметных изменений. Отсутствие в спектре линий поглощения в области  $1880 \text{ см}^{-1}$ , связываемых с диссоциацией NO [17], позволяет сделать вывод, что монослойная плёнка Ni подавляет способность поверхности W(110) разлагать молекулы NO. Спектры NO на моноатомной плёнке отличаются от спектров, наблюдаемых при адсорбции NO на поверхности массивного кристалла Ni(111). В последнем случае наблюдается только одна линия поглощения, которая с ростом покрытия NO смещается в сторону больших волновых чисел до значения  $1587 \text{ см}^{-1}$  при насыщении [9]. Считается, что эта линия обусловлена внутримолекулярным колебанием молекулы NO, адсорбированной на Ni(111) между двумя атомами Ni по мостиковой схеме, а рост волнового числа с покрытием – изменением геометрии адсорбции молекулы от наклонного положения при малых покрытиях до перпендикулярного поверхности при насыщении [9]. Несмотря на общепринятость такой трактовки в течение довольно продолжительного времени, впоследствии появились данные динамической ДМЭ [18], рентгеновской фотоэлектронной дифракции [19, 20], анализа протяжённой тонкой структуры линий рентгеновского поглощения [21], свидетельствующие о том, что молекулы NO при всех покрытиях адсорбированы на поверхности Ni(111) не по мостиковой схеме, как предполагалось ранее, а между тремя атомами Ni в октаэдрических и тетраэдрических пустотах. При этом, однако, нет объяснения сдвига частоты колебаний NO с ростом покрытия. В связи с этим вопрос о типе адсорбционного центра NO на Ni(111), равно как и NO на Pt(111), в настоящее время является предметом дискуссии [22–24].

На рис. 3 (кривая 7) приведён спектр NO на кристалле Ni(111) при насыщающем покрытии, полученный в настоящей работе ( $\nu = 1589 \text{ см}^{-1}$ ). Сопоставляя этот спектр со спектром NO на моноатомной плёнке, можем заключить, что на моноатомной плёнке в отличие от кристалла Ni(111) существует не один, а два типа адсорбированных молекул NO, имеющих частоты внутримолекулярных колебаний  $1507$  и  $1574 \text{ см}^{-1}$ . Близость последнего значения к значению  $\nu$  NO на кристалле ( $1589 \text{ см}^{-1}$ ) позволяет предположить, что на поверхности моноатомной плёнки формируются адсорбционные центры, близкие по геометрическому и электронному строению находящимся на поверхности массивного Ni(111). В то же время некоторое различие в частотах NO ( $\Delta\nu = 15 \text{ см}^{-1}$ ) и, главным образом, наличие дополнительной линии в спектре 4 ( $\nu = 1507 \text{ см}^{-1}$ ) указывают на то, что свойства моноатомной плёнки Ni со структурой (111) на поверхности W(110) не совсем идентич-

ны свойствам кристалла Ni(111) за счет искажения структуры монослойной плёнки, представляющей собой домены со структурой (8×1) [10]. При адсорбции NO на плёнке Ni в два монослоя низкочастотная линия уже не наблюдается, а более интенсивная линия поглощения смещается от 1574 до 1580  $\text{cm}^{-1}$  с одновременным её уширением (рис. 3, кривая 5). По-видимому, следует предположить, что расстояние между линиями, первоначально расположенными при 1507 и 1574  $\text{cm}^{-1}$  (рис. 3, кривая 4), уменьшается при адсорбции NO на плёнке Ni толщиной в два монослоя, и суперпозиция этих линий приводит к указанному уширению (рис. 3, кривая 5). При увеличении толщины плёнки Ni до трёх монослоев линия поглощения сужается и смещается до 1586  $\text{cm}^{-1}$  (рис. 3, кривая 6). Хорошее соответствие формы и положения этой линии с наблюдаемой при адсорбции NO на поверхности кристалла (рис. 3, кривые 6 и 7) позволяет предположить, что адсорбционные свойства плёнки Ni с ориентацией (111) толщиной в три монослоя практически эквивалентны свойствам массивного Ni(111).

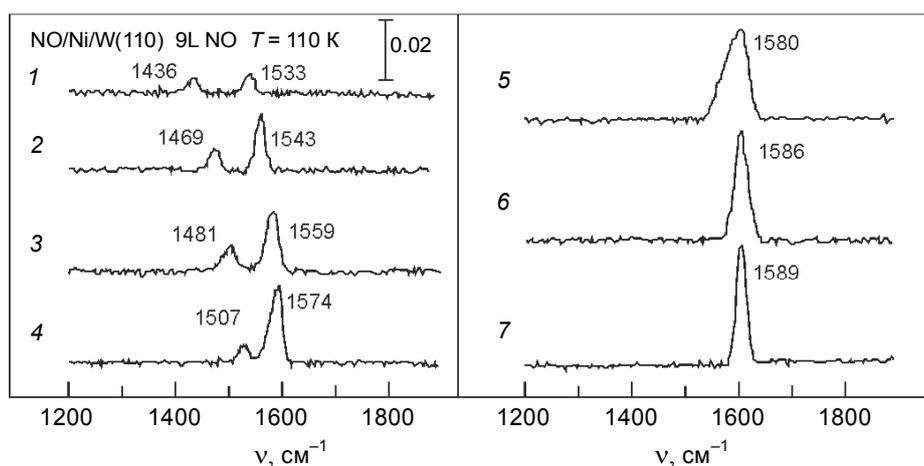


Рис. 3. ИК-спектры NO на поверхности плёнок Ni на W(110) (кр. 1–6) и на поверхности массивного кристалла Ni(111) (кр. 7). Плёнки Ni имеют ориентацию (111) и толщину в один (кр. 1–4), два (кр. 5) и три монослоя (кр. 6). Спектры 1–4 соответствуют разным экспозициям NO (L): кр. 1 – 0.6; кр. 2 – 1.1; кр. 3 – 1.8; кр. 4 – 3; спектры 5–7 – насыщению (экспозиция 3 L). Температура адсорбции NO – 110 K

Видоизменение спектров поглощения (рис. 3, кривые 4–6) с ростом толщины плёнки Ni может быть обусловлено изменением влияния подложки W(110) на величину внутримолекулярной связи NO и изменением структуры плёнки Ni с увеличением её толщины. Несмотря на то, что при одном, двух и трех монослоях наблюдается дифракционная картина, соответствующая грани Ni(111), из-за некоторого несоответствия кристаллографических направлений и постоянных решеток W(110) и Ni(111) при монослойном покрытии имеет место, хотя и незначительное (7%), искажение структуры (111) по сравнению с поверхностью Ni(111) [10], обусловленное, как указано выше, её (8×1)-доменным строением [10]. По-видимому, этим и объясняется различие спектров поглощения NO на монослойной плёнке и на Ni(111). Кроме того, если в соответствии с результатами работ [18–21] предположить, что NO адсорбируется на Ni(111) в пустотах между тремя атомами Ni, то непосредственная близость молекул NO, адсорбированных на поверхности первого монослоя Ni, и нижележащего W может также приводить к искажению спектров. Тот факт, что значения волновых чисел при этом меньше (рис. 3, кривые 4 и 7), объясняется тем, что влияние W приводит к ослаблению внутримолекулярной связи и, следовательно, к уменьшению частоты колебаний молекулы. С ростом толщины плёнки Ni искажения структуры в адплёнке уменьшаются, влияние W(110) ослабевает и спектры NO/Ni/W(110) приобретают вид, характерный для случая адсорбции NO на поверхности кристалла Ni(111) (рис. 3, кривые 5–7).

В результате проведенного исследования можно сделать вывод, что адсорбционные свойства плёнки никеля с ориентацией (111) на поверхности W(110) и массивного кристалла Ni(111) совпадают при толщине слоя Ni в три монослоя. При меньших толщинах наблюдаются различия, обусловленные искажением структуры адплёнки за счёт неполного соответствия параметров симметрии поверхности адсорбата и адсорбента, а также влияния потенциального рельефа W(110)

и проявляющиеся в видоизменении ИК-спектров поглощения NO на Ni/W(110) с уменьшением толщины плёнки Ni от трёх до одного монослоёв.

Автор выражает благодарность профессору F. Zaera (Калифорнийский университет, Риверсайд) и профессору K. Fukutani (университет Токио) за сотрудничество.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Evans J.W., Thiel P.A., and Bartelt M.C. // *Surf. Sci. Rep.* – 2006. – V. 61. – P. 1.
2. Dumas P., Suhren M., Chabal Y.J., et al. // *Surf. Sci.* – 1997. – V. 371. – P. 134.
3. Zhou C., Ma Z., Ren Z., et al. // *Energy Environ. Sci.* – 2012. – V. 5. – P. 6833.
4. Klüner T. // *Progr. Surf. Sci.* – 2010. – V. 85. – P. 279.
5. Panayotov D.A. and Morris J.R. // *Surf. Sci. Rep.* – 2016. – V. 71. – P. 77.
6. Gadzuk J.W., Richter L.J., Buntin S.A., et al. // *Surf. Sci.* – 1990. – V. 235. – P. 317.
7. Fukutani K., Song M.-B. and Murata Y. // *J. Chem. Phys.* – 1995. – V. 103. – P. 2221.
8. Fukutani K., Magkoev T.T., Murata Y., and K. Terakura // *Springer Ser.: Solid State Sci.* – 1996. – V. 121. – P. 217.
9. Chen J.G., Erley W., and Ibach H. // *Surf. Sci.* – 1990. – V. 227. – P. 79.
10. Schmidhals C., Sander D., Enders A., and Kirschner J. // *Surf. Sci.* – 1998. – V. 417. – P. 361.
11. Whitten J.E. and Gomer R. // *Surf. Sci.* – 1994. – V. 316. – P. 1.
12. Владимиров Г.Г., Магкоев Т.Т., Румп Г.А. // *Поверхность.* – 1990. – № 5. – С. 20.
13. Наумовец А.Г. // *УФЖ.* – 1978. – Т. 23. – С. 35.
14. Wandelt K. // *Appl. Surf. Sci.* – 1997. – V. 111. – P. 1.
15. Magkoev T.T., Bliiev A.P., Vladimirov G.G., and Roump G.A. // *Phys. Stat. Sol. (b).* – 1992. – V. 173. – P. 11.
16. Allen G.G., Tucker P.M. and Wild R.K. // *Surf. Sci.* – 1977. – V. 68. – P. 469.
17. Magkoev T.T., Song M.-B., Fukutani K., and Murata Y. // *Surf. Sci.* – 1996. – V. 363. – P. 281.
18. Materer N., Barbieri A., Gardin D., et al. // *Phys. Rev. B.* – 1993. – V. 48. – P. 2859.
19. Mapledoram L.D., Bessent M.P., and King D.A. // *Chem. Phys. Lett.* – 1994. – V. 228. – P. 527.
20. Asensio M.C., Woodruff D.P., Robinson A.W., et al. // *Chem. Phys. Lett.* – 1992. – V. 192. – P. 259.
21. Aminpirooz S., Schmalz A., Becker L., and Haase J. // *Phys. Rev. B.* – 1992. – V. 45. – P. 6337.
22. *Elementary Processes in Excitations and Reactions on Solid Surfaces* / eds. A. Okiji, H. Kasai, and K. Makoshi. – Berlin: Springer, 1997.
23. Bourane A., Dulaurent O., Salasc S., et al. // *J. Catalysis.* – 15 November 2001. – V. 204. – Iss. 1. – P. 77–88.
24. Fajin J.L.C., Cordeiro M.N.D.S., and Gomes J.R.B.A // *J. Phys. Chem. A.* – 2014. – V. 118. – Iss. 31. – P. 5832–5840.

Поступила в редакцию 23.12.2019,  
после доработки – 30.04.2020.

Северо-Осетинский государственный университет им. К.Л. Хетагурова,  
г. Владикавказ, Россия

---

**Магкоев** Тамерлан Таймуразович, д.ф.-м.н., профессор, зав. каф. физики конденсированного состояния СОГУ им. К.Л. Хетагурова, e-mail: t\_magkoev@mail.ru.