

## Форма 501. Краткий научный отчет

### 1.1. Номер проекта

14-02-01236

### 1.2. Руководитель проекта

Минакова Валерия Евгеньевна

### 1.1. Название проекта

Синтез квазиодномерных проводников с волной зарядовой плотности и изучение в них коллективного и одночастичного механизмов переноса заряда с помощью фотопроводимости

### 1.4. Код и название конкурса

А - Конкурс инициативных научно-исследовательских проектов 2014 года

### 1.5. Год представления отчета

2015

### 1.6. Вид отчета (цифра 2 - этап 2015 г.)

2

### 1.7. Содержательная научная часть отчета, публикуемая на сайте Фонда

Создана экспериментальная установка для исследований электрофизических и фотоэлектрических свойств квазиодномерных проводников с волной зарядовой плотности (ВЗП) при растяжении. Объект исследований – впервые созданная на базе высококачественного кристалла ромбического  $\text{TaS}_3$  ( $o\text{-TaS}_3$ ) структура, содержащая области с деформацией  $\varepsilon = 1\%$  и без нее. Основное внимание уделено исследованию омической проводимости  $G(T)$  (ВЗП запиннигована и не дает вклад в проводимость) в области низких температур  $T \lesssim 100$  К (где появляется отклонение  $G(T)$  от первоначального термоактивационного закона, связанного с наличием пайерлсовской щели в спектре возбуждений), а также фотопроводимости  $\delta G(T)$ , появляющейся в той же температурной области.

При растяжении обнаружены значительные дополнительные вклады в  $G(T)$  и  $\delta G(T)$  при  $T \lesssim 60$  К, приводящие к уширению плато  $G(T)$  в области изменения термоактивационного закона и появлению нового низкотемпературного максимума  $\delta G(T)$ , большего по величине, чем основной максимум, связанный, главным образом, с одночастичными возбуждениями. Значения  $G$  и  $\delta G$  растут на порядок по сравнению с нерастянутым со-

стоянием, изменения имеют резкий, почти скачкообразный характер по  $T$  (при слегка разных  $T$  для обеих величин) и связываются с вкладом коллективных возбуждений.

Впервые исследовано влияние легирования In на процессы рекомбинации в  $o$ -TaS<sub>3</sub>. В интервале  $57 < T < 72$  К (режим линейной рекомбинации) получена активационная зависимость времени рекомбинации неравновесных носителей  $\tau(T)$  с энергией активации  $E_\tau = 1000$  К, оценено  $\tau \sim 10^{-4}$  с при  $T \approx 60$  К. Обе величины ниже, чем в чистом  $o$ -TaS<sub>3</sub>, что объясняется появлением дополнительного канала рекомбинации на примесных уровнях, который вымораживается при  $T < 15$  К, приводя к реализации режима квадратичной рекомбинации, хотя и при более низких  $T$ , чем в случае чистого  $o$ -TaS<sub>3</sub>.

Найден подход к описанию особенностей энергетической структуры спектров фотопроводимости пайерлсовских проводников с помощью простой модели модулированной в  $k$ -пространстве величины энергетической щели. Также проведены первопринципные расчеты энергетической структуры и спектров поглощения NbS<sub>3</sub>(I). Для выяснения физического механизма, приводящего к диэлектризации электронного спектра NbS<sub>3</sub>(I), проведены первопринципные расчеты поверхности Ферми структуры, отвечающей гипотетической высокотемпературной фазе. Сделан вывод, что разногласия расчетов с экспериментом вызвано слабым учетом экранировок в теории функционала плотности.

### **1.8. Полное название организации, предоставляющей условия для выполнения работ по Проекту физическим лицам**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова Российской академии наук

*Подпись руководителя проекта*

### **Форма 503. Развернутый научный отчет**

#### **3.1. Номер Проекта**

14-02-01236

#### **3.2. Название Проекта**

Синтез квазиодномерных проводников с волной зарядовой плотности и изучение в них коллективного и одночастичного механизмов переноса заряда с помощью фотопроводимости

### **3.3. Коды классификатора, соответствующие содержанию фактически проделанной работы**

02-202

### **3.4. Объявленные ранее цели Проекта на 2015 год**

Основными задачами проекта на весь срок являются:

1. Синтез кристаллов  $TaS_3$  с различными структурными изменениями и изготовление из них образцов (в том числе и ультратонких) с контактами. К возможным изменениям структуры можно отнести: легирование образца (изменение концентрации и типа примесей), изменение кристаллографической модификации, продольное растяжение образца, изменение изотопного состава, а также создание искажений структуры, в частности, создание протяженных ростовых дефектов.

2. Экспериментальное исследование изменений коллективной и одночастичной проводимостей в полученных объектах с целью выяснения природы низкотемпературной омической проводимости.

3. Экспериментальное исследование особенностей фотопроводимости в образцах с различными структурными изменениями с целью поиска неодночастичного вклада в фотопроводимость.

Основными целями на 2015 год являются:

#### **Технологическая часть.**

1. Преодолеть вышеописанные трудности с технологией синтеза и вырастить чистые кристаллы обеих модификаций  $TaS_3$ .

2. Совместить две имеющиеся у группы экспериментальные методики - методику измерения темновой проводимости и всех характеристик фотопроводимости и методику продольного растяжения образца, позволяющую искусственно переводить  $o$ - $TaS_3$  из несоизмеримого в соизмеримое состояние, и даже далее – в несоизмеримое состояние другого знака. Основные трудности – разместить все в малом объеме и избавиться при этом от эффектов нагрева образца и наводок от источника света.

3. Восстановить сломавшуюся вакуумную установку для лазерного напыления контактов к квазиодномерным проводникам – купить и заменить сгоревший турбомолекулярный насос (Данная установка используется еще в двух проектах РФФИ, проводимых в ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН).

#### **Экспериментальная часть.**

1. Продолжить исследования влияния поляризации света на спектры фотопроводимости в различных имеющихся у нас квазиодномерных соединениях с ВЗП для прояснения природы низкотемпературной омической проводимости, а также природы зависящих от электрического поля внутрищелевых электронных состояний.

2. В случае синтеза чистых кристаллов  $m$ -TaS<sub>3</sub> продолжить исследования темновой проводимости и фотопроводимости для выяснения природы новых обнаруженных особенностей фотопроводимости в этом соединении.

3. Завершить исследования влияния легирования индием на фотопроводимость  $o$ -TaS<sub>3</sub>, проведя исследования температурных зависимостей фотопроводимости и изучив влияние легирования In на характер рекомбинации неравновесных носителей заряда.

4. Приступить к исследованию темновой низкотемпературной проводимости (омической и нелинейной) и фотопроводимости в растянутых образцах. Возможно, дополнительная информация об изменениях низкотемпературной проводимости и фотопроводимости в растянутых образцах поможет также разобраться в причине появления и природе ультракогерентной ВЗП, возникающей при продольном растяжении образцов  $o$ -TaS<sub>3</sub> (этот новый эффект обнаружен недавно в работе [S.G. Zybtsev, V. Ya. Pokrovskii. "Strain-induced formation of ultra-coherent CDW in Quasi-One-Dimensional Conductors". *Physica B: Physics of Condensed Matter*, <http://dx.doi:10.1016/j.physb.2014.11.035>]).

5. Кроме того, вышеперечисленные экспериментальные направления деятельности планируется дополнить теоретическими исследованиями, возложенными на нового члена нашей группы. Предполагается для начала провести первопринципные расчеты энергетической структуры квазиодномерного соединения NbS<sub>3</sub> (I) с целью выяснения физических механизмов перехода этого материала в диэлектрическое состояние, а также расчет оптического спектра поглощения этого материала с целью проверки правильности предложенного нами объяснения особенностей спектров фотопроводимости пайерлсовских проводников.

### 3.5. Полученные в 2015 году важнейшие результаты

#### I. Фотопроводимость и темновая низкотемпературная проводимость образцов $o$ -TaS<sub>3</sub> с продольным фиксированным растяжением.

1. Создана и протестирована уникальная установка в двух конструктивно различных модификациях для измерения низкотемпературной проводимости и фотопроводимости растянутых образцов с двумя различными типами деформации – фиксированной и

регулируемой.

2. Разработана методика создания структур, содержащих как деформированный, так и недеформированный (контрольный) участок на одном образце. На базе единого высококачественного кристалла  $o\text{-TaS}_3$  впервые создана структура, содержащая участки с фиксированной деформацией  $\varepsilon = 1\%$  и без нее  $\varepsilon = 0$ , разделенные буферной зоной, позволяющая исследовать принципиальное различие электрофизических и фотоэлектрических свойств этих двух состояний кристалла.

3. Впервые исследовано влияние растяжения  $o\text{-TaS}_3$  на его низкотемпературную проводимость и фотопроводимость. Обнаружено, что с понижением температуры при  $T \lesssim 60\text{ K}$  в условиях растяжения появляется значительный дополнительный вклад как в проводимость  $G(T)$ , так и в фотопроводимость  $\delta G(T)$ , а именно: в  $G(T)$  наблюдается резкий рост добавочной проводимости в узком ( $\approx 30\text{ K}$ ) интервале температур, приводящий к уширению плато  $G(T)$ , часто наблюдающегося в области изменения термоактивационного закона, а в  $\delta G(T)$  наряду с небольшим ростом основного максимума (связанного, главным образом, с одночастичными возбуждениями) наблюдается появление нового низкотемпературного максимума, даже превосходящего по величине основной. Вызванные растяжением дополнительные вклады в  $G(T)$  и в  $\delta G(T)$  происходят при слегка разных ( $\approx 10\text{ K}$ ) температурах для обеих величин и имеют резкий, почти скачкообразный характер по  $T$ , благодаря этому вкладу обе величины растут почти на порядок по сравнению с нерастянутым состоянием. При этом энергия активации низкотемпературной проводимости  $E_L$  возрастает на  $7\%$ , а величины транспортной пайерлсовской щели  $2\Delta_{tr}$  и энергии активации фотопроводимости  $E_\tau$ , характеризующей зависимость времени рекомбинации неравновесных носителей от  $T$ , существенно не меняются.

4. Выдвинута гипотеза, что избыточная проводимость вызвана ростом концентрации солитонов из-за увеличения степени несоизмеримости ВЗП по отношению к исходной решетке при растяжении. На увеличение степени несоизмеримости ВЗП при растяжении указывалось в работе [S.G. Zybtssev, V.Ya. Pokrovskii, *Physica B*, **460**, 34 (2015)].

5. Полученные результаты позволяют сделать предположение, что и низкотемпературная фотопроводимость (новый низкотемпературный максимум) связана с коллективными возбуждениями ВЗП.

## II. Процессы рекомбинации в $o\text{-TaS}_3$ с примесями In.

1. Впервые проведено исследование влияния легирования индием (внедренного вследствие диффузии In из контактов при нагреве до  $T = 120$  °C в потоке аргона) на процессы рекомбинации в  $o$ -TaS<sub>3</sub>. Исследованы температурные зависимости фотопроводимости  $\delta G(T)$  легированного индием образца  $o$ -TaS<sub>3</sub> при различных (4 порядка) интенсивностях света  $W$ .

2. Определена температурная область  $58 < T < 72$  К наблюдения режима линейной рекомбинации, детектируемого совпадением кривых  $\delta G(T)$ , нормированных на соответствующие интенсивности света  $W$ . Полученная в результате совпадения кривая  $\delta G(T)/W$  отражает температурную зависимость времени рекомбинации возбужденных светом носителей тока  $\tau(T)$  в этом диапазоне температур [S.V. Zaitzev-Zotov, V.E. Minakova, *Phys.Rev.Lett.*, 97, 266404 (2006)]. Величина энергии активации фотопроводимости,  $E_\tau$ , в исследованном образце с примесями In составила 1000 К, что заметно меньше, чем в чистых образцах  $o$ -TaS<sub>3</sub>  $E_\tau = (1300 \pm 100)$  К, и больше, чем в образцах  $o$ -TaS<sub>3</sub> с примесями Nb (0.5 %)  $E_\tau = (720 \pm 80)$  К. Полученная оценка времени рекомбинации неравновесных носителей тока при  $T \approx 60$  К составила  $\tau(60K) \sim 10^{-4}$  с, что приблизительно в 50 раз меньше, чем в чистом  $o$ -TaS<sub>3</sub>, и приблизительно в 3-10 раз больше, чем в образцах с примесями Nb (0.5 %), при той же температуре.

3. Установлено, что совпадение кривых  $\delta G(T)$ , нормированных на величину  $\sqrt{W}$ , свидетельствующее о реализации режима квадратичной рекомбинации, происходит при  $T < 15$  К. В чистых образцах  $o$ -TaS<sub>3</sub> этот режим достигается при более высоких температурах  $T \lesssim 40$  К, а в образцах  $o$ -TaS<sub>3</sub> с примесями Nb (0.5 %) в исследованном интервале температур не наблюдается.

4. Изменение параметров рекомбинации - уменьшение  $\tau$  и  $E_\tau$  и сдвиг режимов линейной и квадратичной рекомбинации в область низких температур при внесении примесей - объясняется появлением дополнительного канала рекомбинации на примесях. (При этом количество внедренного In оказывается слишком малым для полного исчезновения режима квадратичной рекомбинации: появление примесных уровней, ускоряющих рекомбинацию при высоких  $T$ , перестает сказываться при  $T < 15$  К и лишь сдвигает начало режима квадратичной рекомбинации в область низких  $T$ ). Обнаруженные изменения параметров рекомбинации сопровождаются изменением спектров фотопроводимости и появлением внутрищелевых состояний, а также ростом порогового поля нелинейной проводимости  $E_T$  и уменьшением температуры пайерлсовского перехода

ГР [V.F. Nasretdinova, E.B. Yakimov, S.V. Zaitsev-Zotov, «Indium doping-induced change in the photoconduction spectra of *o*-TaS<sub>3</sub>», *Physica B: Condensed Matter*, **460**, 180 (2015)].

### III. Расчеты энергетической структуры и спектров оптического поглощения квазиодномерных соединений

1. Предложена простая модель модулированной в  $k$ -пространстве величины энергетической щели, хорошо описывающая полученные в рамках данного проекта спектральные данные исследованных квазиодномерных соединений: K<sub>0.3</sub>MoO<sub>3</sub>, NbS<sub>3</sub>(I), *m*-TaS<sub>3</sub>, а также чистых образцов *o*-TaS<sub>3</sub> (вблизи края фундаментального поглощения). Ряд особенностей этих спектров объясняется проявлением сингулярностей ван Хова.

2. С помощью пакета abinit [www.abinit.org] в приближениях LDA, GGA, PAW на основе известного для структуры NbS<sub>3</sub>(I) расположения атомов в элементарной ячейке проведены расчеты из первых принципов энергетической структуры и спектров оптического поглощения данного материала. Во всех случаях расчетная величина энергетической щели  $2\Delta_{opt} \approx 0.3$  эВ оказалась меньше экспериментально измеренной  $2\Delta_{opt} \approx 1$  эВ (транспортные измерения и измерения спектров фотопроводимости). Также получено отличие расчетной и экспериментальной форм спектров оптического поглощения. Сделан вывод, что использованные приближения не учитывают важных взаимодействий, влияющих на формирование энергетической структуры. Сделано предположение, что для получения лучшего согласия с экспериментом следует использовать GW приближение, основанное на использовании функций Грина, значительно лучше учитывающее электрон-электронное взаимодействие.

3. С целью выяснения механизмов перехода NbS<sub>3</sub>(I) в диэлектрическое состояние в приближении PAW проведены расчеты из первых принципов поверхности Ферми структуры, отвечающей гипотетической высокотемпературной фазе NbS<sub>3</sub>(I), которая рассматривалась как структура без димеризации. Как и ожидалось, полученное состояние оказалось металлическим, но с не идеальными условиями для нестинга: несмотря на возможность наложения широких областей поверхности Ферми друг на друга смещением вдоль всех трех направлений, наличие карманов на краях зоны Бриллюэна приводило бы к тому, что в NbS<sub>3</sub>(I) ниже пайерсловского перехода часть электронов оставалась бы не сконденсированной и обеспечивала бы металлическую проводимость этого соединения, что противоречит эксперименту: димеризованная фаза – диэлектрик. Сделано предположение, что это расхождение также может быть устранено при более

тщательном учете экранировок в GW приближении.

### 3.6. Сопоставление полученных результатов с мировым уровнем

#### I. Низкотемпературная проводимость и фотопроводимость образцов $o$ -TaS<sub>3</sub> с продольным растяжением.

Подобные исследования ранее никем в мире не проводились.

Данный проект посвящен одному из важных и до сих пор не решенных вопросов в физике квазиодномерных проводников с ВЗП – вопросу о природе низкотемпературной омической (ВЗП запиннигована) проводимости, а именно: чем обусловлена проводимость, добавляющаяся к проводимости квазичастиц, возбужденных через пайерлсовскую щель, при температурах, приблизительно вдвое ниже температуры пайерлсовского перехода  $T_P = 220$  К, и приводящая к почти двукратному увеличению энергии активации низкотемпературной омической проводимости по сравнению с омической проводимостью при высоких температурах  $T_P/2 \lesssim T < T_P$ ? Это отклонение было обнаружено в работе [*T. Takashima et al. Sol. State Commun.*, **35**, 911 (1980)], и избыточная проводимость предположительно приписывалась коллективным возбуждениям ВЗП, обусловленным наличием степеней свободы ВЗП (фазовых и амплитудных солитонов и т.д.). Оказалось, что такое поведение демонстрирует не только  $o$ -TaS<sub>3</sub>, но и другие соединения с ВЗП, в частности, исследованный в рамках данного проекта  $m$ -TaS<sub>3</sub> [*V.E. Minakova, V.F. Nasretdinova, S.V. Zaitsev-Zotov. Physica B: Condensed Matter*, **460**, 185(2015)], голубые бронзы, (TaSe<sub>4</sub>)<sub>2</sub>I [*P. Monceau, Adv. Phys.* **61** (2012) 325], а также соединения с волнами спиновой плотности [*G. Grüner. Rev. Mod. Phys.* **66** (1994) 1]. Иногда переходная область изменения термоактивационного закона может существенно растягивается по температуре, в результате чего на зависимости  $G(T)$  появляется “плато” проводимости – область слабого изменения  $G(T)$ , соединяющая участки с различной энергией активации.

Продвинуться немного далее в понимании природы низкотемпературной проводимости пайерлсовских проводников помогло обнаружение фотопроводимости [*S. V. Zaitsev-Zotov, V. E. Minakova. JETP Lett.*, **79** (2004) 550]. (Отметим, что других групп, умеющих исследовать фотопроводимость квазиодномерных проводников и с ее помощью – низкотемпературную проводимость, в мире пока не имеется). Изучение фотопроводимости показало, что одночастичный канал проводимости в номинально чистых и пространственно однородных образцах  $o$ -TaS<sub>3</sub> не может быть определяющим при низких



температурах. По-видимому, он шунтируется дополнительным неодночастичным механизмом низкотемпературной проводимости, обусловленным наличием степеней свободы ВЗП [*S. V. Zaitzev-Zotov, V. E. Minakova, Phys.Rev.Lett., 97, 266404 (2006)*]. При этом ряд результатов наших исследований низкотемпературной проводимости и фотопроводимости *o-TaS<sub>3</sub>* давал малопонятный разброс данных, сложно объяснимый без привлечения каких-то новых предположений о различном состоянии исследуемых объектов. Одно из них – предположение о разной степени неконтролируемого растяжения изучаемых образцов, которое может возникать, в частности, при монтаже образца на подложке или вследствие особенностей роста кристалла. Различная степень растяжения образцов может приводить к различным состояниям ВЗП, которое характеризуется волновым вектором ВЗП,  $q(T)$ , а он, как известно, очень чувствителен к деформациям. При этом в образцах *o-TaS<sub>3</sub>* без растяжения  $q(T)$  при высоких температурах слегка несоизмерим с волновым вектором исходной решетки и стремится к соизмеримому значению при уменьшении температуры до  $T \approx 30$  К [*K. Inagaki, M. Tsubota, K. Higashiyama et al., J. Phys. Soc. J., 77, 093708 (2008)*]. Увеличением степени соизмеримости, вызванной изменением  $q(T)$  при растяжении, объяснялись многочисленные эксперименты, демонстрирующие значительную трансформацию транспортных свойств *o-TaS<sub>3</sub>* вследствие растяжения [*V. B. Preobrazhensky, A. N. Taldenkov, I. Yu. Kal'nova, JEPT Lett., 40, 944 (1984)*; *V. B. Preobrazhensky, A. N. Taldenkov, Synth. Met., 29, F321 (1989) and references therein*; *R. S. Lear, M. J. Skove, E. P. Stillwell, J. W. Brill, Phys.Rev.B, 29, 5656 (1984)*; *T. A. Davis, W. Schaffer, M. J. Skove, E. P. Stillwell, Phys.Rev.B, 39, 10094 (1989)*; *Z. G. Xu, J. W. Brill, Phys.Rev.B, 43, 11037 (1991)*; *Kanta Das, M. Chung, M. J. Skove, G. X. Tessema, Phys.Rev.B, 52, 7915 (1995)*]. Однако в недавней работе [*S. G. Zybtev, V. Ya. Pokrovskii, Physica B, 460, 34 (2015)*] было показано, что растяжение *o-TaS<sub>3</sub>*, наоборот, увеличивает степень несоизмеримости ВЗП, приводя к росту концентрации солитонов. (Отметим, что все эти эксперименты проводились при  $T > 77$  К.) Наше предположение о том, что существенные различия электрофизических и фотоэлектрических свойств образцов при низких температурах возникают вследствие неконтролируемого растянутого состояния образца, показалось нам весьма логичным и требовало проверки. Поэтому было принято решение использовать растяжение как новый метод изучения природы низкотемпературной омической проводимости пайерлсовских проводников. Для этого необходимо было провести поиск качественного различия электрофизических и

фотоэлектрических свойств двух состояний образца – при контролируемом фиксированном растяжении и без него – одновременно осуществленных на одном и том же кристалле.

Для решения поставленной задачи на базе высококачественного кристалла  $o$ -TaS<sub>3</sub> (пороговое поле начала нелинейной проводимости  $E_T = 1$  В/см) впервые была создана 4-контактная структура, содержащая сегмент А без деформации ( $\varepsilon = 0$  %,  $l_A = 0.5$  мм), сегмент В с деформацией ( $\varepsilon = 1$  %,  $l_B = 0.4$  мм), разделенные промежуточной буферной зоной С ( $l_C = 0.3$  мм). Ширина контактов была  $\approx 0.2$  мм.

Исследования проводимости  $G$  и фотопроводимости  $\delta G$  данной структуры ярко проявили влияние продольного растяжения  $o$ -TaS<sub>3</sub> на его свойства при низких температурах. Было обнаружено, что в условиях растяжения появляется значительный дополнительный вклад как в  $G$ , так и в  $\delta G$  при понижении температуры ниже  $T \lesssim 60$  К. На температурных зависимостях эти изменения проявляются как уширение плато  $G(T)$  и появление нового низкотемпературного максимума  $\delta G(T)$ , большего по величине, чем основной максимум (связанный, главным образом, с одночастичными возбуждениями), который лишь слегка подрастает при растяжении. Вследствие растяжения значения  $G$  и  $\delta G$  увеличиваются почти на порядок по сравнению с нерастянутым состоянием, эти изменения происходят в узком ( $\approx 30$  К) интервале температур, то есть имеют резкий, почти скачкообразный характер по температуре, хотя и происходят при слегка разных ( $\approx 10$  К) температурах для обеих величин.

Поскольку одновременный рост низкотемпературной проводимости и фотопроводимости противоречит модели квадратичной рекомбинации (ускорение релаксации из-за роста концентрации носителей должно уменьшать фотопроводимость), но соответствует выводам работ [T. Takoshima et al. *Sol. State Commun.*, **35**, 911 (1980); S.V. Zaitzev-Zotov, V.E. Minakova, *Phys.Rev.Lett.*, **97**, 266404 (2006)] о коллективном механизме низкотемпературной проводимости, сделано предположение, что избыточная проводимость вызвана ростом концентрации солитонов из-за увеличения степени несоизмеримости ВЗП по отношению к исходной решетке [S.G. Zybtssev, V.Ya. Pokrovskii, *Physica B*, **460**, 34 (2015)]. Более того, полученные результаты позволяют сделать предположение, что и природа низкотемпературной фотопроводимости (низкотемпературный максимум) также имеет коллективный характер. Для подтверждения правильности этих предположений требуются дальнейшие исследования.

## II. Влияние примесей на энергетическую структуру и фотоэлектрические свойства $o$ -TaS<sub>3</sub>.

Подобные исследования ранее никем в мире не проводились.

Впервые проведенное исследование влияния легирования индием (интеркалированным с помощью температурной диффузии из контактов) на процессы рекомбинации в  $o$ -TaS<sub>3</sub> – заключительный этап наших исследований влияния примесей на фотоэлектрические характеристики, энергетическую плотность состояний и перенос заряда.

До начала исследований многие вопросы, касающиеся структуры пайерлсовской щели и влияния на нее примесей, оставались открытыми. Даже величина пайерлсовской щели в чистых образцах  $o$ -TaS<sub>3</sub> не была четко определена: разброс ее был почти двукратным. Так измерения температурных зависимостей проводимости [*P. Monceau. "Electronic Properties of Inorganic Quasi-one-dimensional Conductors Part 2. (Ed. by P. Monceau. Dordrecht: D. Reidel Publ. Comp., 1985)*] и константы Холла [*Ю. И. Латышев, Я. С. Савицкая, В. В. Фролов. Письма в ЖЭТФ, 83, 446 (1983)*] давали величину транспортной пайерлсовской щели  $2\Delta_{tr} = 2 \cdot (800 \div 1000) \text{ К} \approx 0.15 \text{ эВ}$ ; спектры болометрического отклика демонстрировали начало поглощения при  $2\Delta'_{opt} = 0.125 \div 0.15 \text{ эВ}$  [*М. Е. Иткус, Ф. Я. Надь. Письма в ЖЭТФ, 39, 373 (1984)*; *S. L. Herr, G. Minton, J. W. Brill. Phys.Rev. B 33, 8851 (1986)*]. Наши предварительные исследования спектров фотопроводимости [*В. Ф. Насретдинова, С. В. Зайцев-Зотов. Письма в ЖЭТФ, 89, 607 (2009)*] выявили сильное различие величины оптической пайерлсовской щели даже для высококачественных образцов от разных производителей, показав, что  $2\Delta_{opt} > 0.22 \text{ эВ}$ , кроме того были зафиксированы внутрищелевые состояния, появляющиеся при энергиях фотонов  $\hbar\omega > 0.15 \text{ эВ}$ . Отметим, что до появления наших работ по фотопроводимости экспериментальные данные о плотности состояний вблизи края пайерлсовской щели были очень скудные [*S. L. Herr, G. Minton, J. W. Brill. Phys.Rev. B 33, 8851 (1986)*; *G. Minton, J. W. Brill. Solid State Commun. 65,1069 (1988)*], информация о влиянии примесей на плотность состояний ниже  $T_P$  отсутствовала, хотя о сильном влиянии примесей на электрофизические свойства пайерлсовских проводников было хорошо известно. Количественные теории, позволяющие рассчитать энергетическую структуру, не существовали. При этом имелось предсказание теории [*I. Tüttö, A. Zawadowski. Phys. Rev. B 32, 2449 (1985)*] об изменении оптических спектров в пайерлсовском состоянии при введении примесей — при малых концентрациях на-

личие пиков, а при больших — хвоста состояний внутри и сдвига начала поглощения  $2\Delta'_{opt} = 2\Delta_{opt}(1-k^2)^{1/2}$ , где  $k = A/v_F$  и  $A$  — амплитуда обратного рассеяния на примеси, а  $v_F$  — скорость Ферми.

Наше исследование, проведенное в рамках данного проекта [V.F. Nasretdinova, E.B. Yakimov, S.V. Zaitsev-Zotov. *Physica B: Condensed Matter*, **460**, 180 (2015)], впервые продемонстрировало влияние примесей In на энергетическую структуру пайерлсовских проводников, чье изменение коррелировало с изменением вольт-амперных характеристик и понижением температуры пайерлсовского перехода  $T_P$ . Это исследование позволило сделать вывод, что истинная величина пайерлсовской щели в чистом *o*-TaS<sub>3</sub> составляет  $2\Delta_{opt} = 0.25$  эВ, а фотопроводимость при энергиях, меньших  $2\Delta_{opt}$ , связана (в согласии с теорией) с примесным вкладом, который линейно возрастает с временем диффузии.

Последний этап этого исследования, заверченный в текущем году, был посвящен изучению изменения характера рекомбинации при внесении примесей. Ранее, в работе [S.V. Zaitsev-Zotov, V.E. Minakova, *Phys.Rev.Lett.*, **97**, 266404 (2006)] по исследованию фотопроводимости в чистых образцах *o*-TaS<sub>3</sub>, были обнаружены два режима рекомбинации носителей тока: квадратичный — при низких температурах ( $T \lesssim 40$  К), доказывающий отсутствие канала рекомбинации на примесях, и линейный — при высоких температурах ( $60 \text{ К} \lesssim T \lesssim 100 \text{ К}$ ), позволивший нам оценить время рекомбинации носителей тока  $\tau \sim 10^{-3} - 10^{-2}$  с при  $T \approx 60$  К и получить его температурную зависимость  $\tau(T)$ , которая оказалась активационной, с энергией активации  $E_\tau = (1300 \pm 100)$  К.

Первоначальные исследования влияния примесей на характер рекомбинации были проведены на кристаллах *o*-TaS<sub>3</sub>, в которые при синтезе вводились примеси Nb. Концентрация их — 0.5 % — была сравнительно небольшая, то есть не приводящая к смене температурных и полевых зависимостей на степенные, которые характерны для одномерных электронных систем [J. Voit. *Rep. Prog. Phys.* **58**, 977 (1995)] и описываются появлением качественно нового состояния — жидкости Латтинджера, стабилизированной примесями [С. Н. Артёменко. *Письма в ЖЭТФ* **79**, 335 (2004)]. Было обнаружено, что в *o*-TaS<sub>3</sub> с примесями Nb(0.5 %) квадратичный режим в исследованном диапазоне температур не наблюдается, а линейный режим сдвигается в среднем на 8 К в область низких температур и характеризуется существенным уменьшением (в  $1.5 \div 2$  раза) величины  $E_\tau = (720 \pm 80)$  К. Кроме того, было обнаружено значительное уменьшение сигнала

ла фотопроводимости, вызванное уменьшением величины  $\tau$ , в частности, при  $T \approx 60$  К величина  $\tau$  в  $130 \div 500$  раз меньше, чем в чистом  $o$ -TaS<sub>3</sub>.

Далее, в результате исследований, проведенных на  $o$ -TaS<sub>3</sub> с интеркалированным In, было установлено, что высокотемпературная область  $58 < T < 72$  К характеризуется режимом линейной рекомбинации с величиной  $E_\tau = 1000$  К и величиной  $\tau$  при  $T \approx 60$  К, в 50 раз меньшей, чем в чистых образцах. При этом в низкотемпературной области, как и в случае чистых образцов, устанавливается режим квадратичной рекомбинации, хотя и при более низких температурах  $T < 15$  К. Таким образом, образцы с In по всем параметрам, характеризующим процессы рекомбинации в  $o$ -TaS<sub>3</sub>, занимают промежуточное место между образцами  $o$ -TaS<sub>3</sub> с примесями Nb (0.5 %) и без них.

Отметим, что полученные зависимости  $\tau(T)$  находятся в хорошем согласии с характерным временем  $\tau_\alpha$  основного процесса диэлектрической релаксации ( $\alpha$ -процесс), измеренным в работе [D. Staresinić, K. Biljaković, W. Brütting, K. Hosseini, P. Monceau, H. Berger, F. Levy. *Phys. Rev. B* **65**, 165109 (2002)], что, по-видимому, говорит об общей природе этих явлений.

Итак, данные исследования завершены, подытожим их результаты. Введение примесей приводит к коррелированному изменению энергетической структуры, фотоэлектрических и электрофизических свойств пайерлсовских проводников, что проявляется в размытии края фундаментального поглощения и появлении внутрищелевых состояний в спектрах фотопроводимости; сдвиге областей линейной и квадратичной рекомбинации в сторону низких температур, уменьшении времени рекомбинации носителей тока и более слабой его зависимости от  $T$ , а также увеличении порогового поля начала нелинейной проводимости  $E_T$  и уменьшении температуры пайерлсовского перехода  $T_P$ .

### **III. Расчеты энергетической структуры и оптических спектров поглощения квазиодномерных соединений**

Как уже отмечалось выше, количественные теории, позволяющие точно рассчитать энергетическую структуру квазиодномерных проводников с ВЗП до сих пор отсутствуют. Однако попытки таких расчетов все таки предпринимались. Так в цикле теоретических работ на основе метода локализованных орбиталей в приближении Хартри-Фока-Слэтера, проведенных на заре изучения квазиодномерных проводников [D.W. Bullett. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **12**, 2777 (1979); D.W. Bullett. *Solid State Commun.* **26**, 563 (1978); D.W. Bullett. *J. Solid State Chem.* **33**, 13 (1980)], были представлены численные

расчеты зонной структуры и плотности состояний некоторых трихалькогенидов переходных металлов:  $ZrSe_3$ ,  $TaSe_3$ ,  $NbSe_3$  и  $NbS_3(I)$ . Эти расчеты качественно объясняли полупроводниковое поведение, характерное для  $ZrSe_3$  и  $NbS_3(I)$ , и металлическое – для  $TaSe_3$  и  $NbSe_3$ , а также возможность реализации пайерлсовского перехода в  $NbSe_3$ , однако давали количественное различие для величин энергетических щелей. В частности, для  $NbS_3(I)$  расчетная величина  $2\Delta_{opt} \approx 0.5$  эВ оказалась вдвое меньше экспериментально измеренной.

Вновь актуальными подобные расчеты оказались сейчас, когда в результате проведенных нами в рамках данного проекта исследований фотопроводимости были впервые измерены спектры четырех квазиодномерных соединений – моноклинного и ромбического  $TaS_3$ , голубой бронзы  $K_{0.3}MoO_3$  и  $NbS_3(I)$ , в результате чего были получены не только точные величины оптических пайерлсовских щелей в этих материалах, но и новая информация о деталях их энергетических структур.

С помощью простой модели модуляции величины пайерлсовской щели в импульсном пространстве (возникающей вследствие трехмерного взаимодействия цепочек) нам удалось описать полученные особенности энергетической структуры вблизи края фундаментального поглощения и установить их происхождение [*S.V. Zaitsev-Zotov, V.F. Nasretdinova, V.E. Minakova. Physica B: Condensed Matter, 460, 174 (2015)*]. Прекрасное согласие расчетных спектров оптического поглощения, полученных в этой модели, с реальными спектрами фотопроводимости для всех соединений показало, что ряд особенностей этих спектров на самом деле является проявлением сингулярностей ван Хова. Отметим, что в теоретической работе [*K. Yamaji. J. Phys. Soc. Jpn. 51 2787 (1982)*], учитывающей периодическую в  $k$ -пространстве модуляцию потолка валентной зоны и дна зоны проводимости при постоянной величине пайерлсовской щели, сингулярности ван Хова в оптических спектрах не возникали.

Далее, с целью проверки правильности предложенного нами объяснения особенностей спектров фотопроводимости пайерлсовских проводников, у нас возникло желание рассчитать те же спектры поглощения из первых принципов, пользуясь известным для структуры  $NbS_3(1)$  расположением атомов в элементарной ячейке. Для этого сначала были проведены расчеты энергетической структуры данного материала, а на основе полученных данных рассчитывались спектры оптического поглощения. Расчеты проводились с помощью пакета abinit [www.abinit.org] в приближениях LDA, GGA, PAW.

Оказалось, что во всех случаях наши расчеты также дают заниженную величину энергетической щели  $2\Delta_{opt} \approx 0.3$  эВ, как и в численных расчетах [*D.W. Bullett. J. Solid State Chem.* **33**,13 (1980)]. Кроме того, найденная форма спектра оптического поглощения  $\text{NbS}_3(1)$  существенно отличалась от полученного экспериментально. Это означает, что важные взаимодействия, влияющие на формирование энергетической структуры, в использовавшихся приближениях не учитывались. По-видимому, для расчетов энергетической структуры данного соединения следует использовать GW приближение, основанное на использовании функций Грина, которое значительно лучше учитывает электрон-электронное взаимодействие, однако является намного более трудоемким.

Второй тип проведенных нами расчетов из первых принципов имел целью выяснение механизмов перехода  $\text{NbS}_3(1)$  в диэлектрическое состояние и состоял в проведении расчета поверхности Ферми структуры, отвечающей гипотетической высокотемпературной фазе и получающейся из известной димеризованной структуры ее симметризацией, удаляющей димеризацию. В таком подходе подобные задачи ранее не решались. Расчеты проводились методом PAW. Как и ожидалось, полученное состояние оказалось металлическим. Форма поверхности Ферми имела широкие области, которые могут быть наложены друг на друга смещением вдоль всех трех направлений. Однако такое совмещение не является идеальным и оставляет карманы на краях зоны Бриллюэна. Это означает, что в состоянии, которое могло бы возникнуть в этом соединении при пайерсовском переходе, часть электронов оставалась бы не сконденсированной и обеспечивала бы металлическую проводимость этого соединения, в то время как на самом деле димеризованная фаза является диэлектрической. Мы полагаем, что это расхождение также связано с необходимостью учитывать электрон-электронное взаимодействие и ожидаем, что оно исчезнет в GW приближении.

### **3.7.1. Методы и подходы, использованные в ходе выполнения Проекта**

#### **Технологическая часть.**

1) Для синтеза кристаллов  $\text{NbS}_3$  (I) и (II) фазы, а также кристаллов  $\text{TaS}_3$  обеих модификаций использовалась оригинальная (в случае *m*- $\text{TaS}_3$  уникальная) технология с использованием градиентного метода. Он основан на проведении в замкнутом объеме процессов синтеза  $\text{TaS}_3$  (или  $\text{NbS}_3$ ) за счет гетерогенной реакции между Ta (или Nb) и S и кристаллизации в температурном поле с малым градиентом. Длительность процесса варьировалась от трех до 10 суток. В ряде случаев использовались промежуточные

термоциклирования.

2) Для интеркаляции In в  $o$ -TaS<sub>3</sub> использовался метод температурной диффузии, предложенный в работе [J.C. Gill. *Phys. Rev. B* **53**, 15586 (1996)]: образец  $o$ -TaS<sub>3</sub> с прижимными контактами из индия выдерживался при температуре  $T = 120$  °C в потоке аргона в течение фиксированных промежутков времени от 1 до 10 часов, суммарно – 23 часа.

3) В распоряжении нашей группы имеется две оригинальные принципиально различные методики растяжения квазиодномерных соединений. Первая, на основе системы пружин разной жесткости (с промежуточным использованием дополнительной подложки при монтаже) позволяет получить фиксированную (доходящую до 3 %) деформацию образца. В текущем году эта методика была усовершенствована: разработана и впервые осуществлена возможность создания на базе единого высококачественного кристалла 4-контактной структуры, содержащий участки с деформацией и без нее, разделенные буферной зоной. Такая структура удобна для контроля за качественными изменениями в свойствах кристалла при растяжении. Вторая методика (с использованием деформируемой полимерной подложки на основе эпоксидных смол) позволяет обратимо регулировать величину деформации образца в процессе измерений и использовать ультратонкие (меньше 1 мкм) кристаллы. Предел упругости такой подложки составляет 5 % при комнатной и 1 % при гелиевой температуре. Эта методика удобна для изучения количественных изменений характеристик кристалла в условиях растяжения.

4) В ряде случаев для приготовления контактов использовался метод лазерного напыления. Имеющаяся у нас установка позволяет делать высококачественные (низкоомные, стабильные, без инородных примесей) контакты практически из любых (даже тугоплавких) материалов (наиболее частые – Au, Pt, Ag, In) ко всем квазиодномерным соединениям с ВЗП. Кроме того, с ее помощью возможно получение различных конфигураций контактов (в том числе многозондовых с малой шириной контакта и расстояния между ними и поперечных к кристаллам шириной 5-10  $\mu\text{m}$ ).

#### **Экспериментальная часть.**

1) Для проведения исследований использовалась разработанная нами методика измерений малых токов (до  $10^{-15}$  А), позволяющая продвинуться в область низких температур.

2) Для исследования особенностей фотопроводимости в полученных объектах ис-



пользовалась разработанная нами уникальная методика всестороннего и систематического исследования фотопроводимости, проводимого как при стационарном, так и при модулированном освещении, включающего в себя: исследование зависимостей фотопроводимости от температуры, напряжения на образце, мощности и частоты модуляции освещения, исследование кинетики фотопроводимости и, наконец, спектральной зависимости с возможностью исследования зависимости от поляризации света.

### **3.7.2. Вклад каждого члена коллектива в выполнение Проекта в 2015 году (указать работу, выполненную каждым членом коллектива по Проекту в 2015 году с новой строки)**

1. Минакова Валерия Евгеньевна – синтез кристаллов  $TaS_3$  обеих модификаций, измерения температурных и полевых зависимостей проводимости и фотопроводимости.

2. Насретдинова Венера Фатиховна – синтез кристаллов  $NbS_3$  первой (I) и второй (II) фазы, измерения температурных и полевых зависимостей проводимости и спектров фотопроводимости.

3. Никитина Анна Мейровна – синтез кристаллов  $TaS_3$  обеих модификаций.

4. Зыбцев Сергей Григорьевич – изготовление контактов с помощью лазерного напыления, изготовление образцов с регулируемым продольным растяжением.

5. Талденков Александр Николаевич – изготовление образцов и структур с фиксированным продольным растяжением.

6. Павловский Валерий Владимирович – проведение первопринципных расчетов.

### **3.8.1. Количество научных работ по Проекту, опубликованных в 2015 году**

8

#### **3.8.1.1. Из них в изданиях, включенных в перечень ВАК**

0

#### **3.8.1.2. Из них в изданиях, включенных в библиографическую базу данных РИНЦ**

3

#### **3.8.1.3. Из них в изданиях, включенных в международные системы цитирования (библиографические и реферативные базы научных публикаций)**

3

### **3.8.2. Количество научных работ, подготовленных в ходе выполнения Про-**

екта и принятых к печати в 2015 году (цифрами)

0

### **3.9. Участие в 2015 году в научных мероприятиях по тематике Проекта**

1. XIII Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, г. Троицк, 5 июня 2015, стендовый доклад.
2. XXXVII Совещание по физике низких температур, Казань, 29 июня – 3 июля, 2015, стендовый доклад.
3. XII Российская конференция по физике полупроводников “Полупроводники 2015”, Ершово, 21 - 25 сентября 2015, стендовый доклад.
4. Международная конференция “Nonequilibrium Phenomena in Complex Matter: new observations and new theories”, Krvavec, Slovenia, 13 - 16 December 2015, устный доклад.

### **3.10. Участие в 2015 году в экспедициях по тематике Проекта, которые проводились при финансовой поддержке Фонда**

#### **3.11. Финансовые средства, полученные в 2015 году от РФФИ (в руб.)**

400000,00

#### **3.12. Адреса (полностью) ресурсов в Интернете, подготовленных авторами по данному Проекту**

1. <http://arxiv.org/abs/1411.0167>
2. <http://arxiv.org/abs/1410.7002>
3. <http://arxiv.org/abs/1411.0253>
4. <http://arxiv.org/abs/1512.06755>

#### **3.13. Библиографический список всех публикаций по Проекту, опубликованных в 2015 году, в порядке значимости: монографии, статьи в научных изданиях, тезисы докладов и материалы съездов, конференций и т.д.**

1. V.E. Minakova, V.F. Nasretdinova, S.V. Zaitsev-Zotov. «Photoconduction in Peierls conductor monoclinic TaS<sub>3</sub>», Physica B: Condensed Matter, **460**, 185 (2015).
2. S.V. Zaitsev-Zotov, V.F. Nasretdinova, V.E. Minakova. «Charge-density waves physics revealed by photoconduction». Physica B: Condensed Matter, **460**, 174 (2015).
3. V.F. Nasretdinova, E.B. Yakimov, S.V. Zaitsev-Zotov, «Indium doping-induced change in the photoconduction spectra of o-TaS<sub>3</sub>», Physica B: Condensed Matter, **460**, 180 (2015).
4. В.Ф. Насретдинова. ”Фотоэлектрическая спектроскопия квазиодномерных соедине-

ний  $p\text{-TaS}_3$ ,  $\text{NbS}_3(\text{I})$  и  $\text{K}_0.3\text{MoO}_3$ “. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Москва, 2015.

5. В.Ф. Насретдинова. ”Фотоэлектрическая спектроскопия квазиодномерных соединений  $p\text{-TaS}_3$ ,  $\text{NbS}_3(\text{I})$  и  $\text{K}_0.3\text{MoO}_3$ “. Автореферат к диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Москва, 2015.

6. В.Е. Минакова, А.Н. Талденков, С.В. Зайцев-Зотов. ”Влияние одноосного растяжения пайерлсовского проводника  $o\text{-TaS}_3$  на его низкотемпературную проводимость и фотопроводимость”. XIII Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», 2015, Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, г. Троицк, Тезисы докладов, стр. 23.

7. В.Е. Минакова, А.Н. Талденков, С.В. Зайцев-Зотов. ”Низкотемпературная проводимость и фотопроводимость пайерлсовского проводника  $o\text{-TaS}_3$  при одноосном растяжении“. XII Российская конференция по физике полупроводников ”Полупроводники 2015”, Ершово, 2015. Тезисы докладов, стр. 269.

8. V.E. Minakova, A.N. Taldenkov, S.V. Zaitsev-Zotov. ”Photoconduction and low-temperature Ohmic conduction of Peierls conductor  $o\text{-TaS}_3$  under uniaxial strain“. XXXVII Собрание по физике низких температур, Казань, 2015. Тезисы докладов, стр. 189.

9. Venera Nasretdinova, Vadim Pokrovsky, Sergey Zaitsev-Zotov and Sergey Zybtsev. ”Light-induced transition from hard to soft gap in CDW conductor  $\text{NbS}_3$  (phase II) at 77 K“. Международная конференция ”Nonequilibrium Phenomena in Complex Matter: new observations and new theories“. Book of Abstracts, Ambrož, Krvavec, Slovenia, 13-16 December, 2015, p.46.

**3.14. Приоритетное направление развития науки, технологий и техники РФ, которому, по мнению исполнителей, соответствуют результаты данного Проекта**

Индустрия наносистем

**3.15. Критическая технология РФ, которой, по мнению исполнителей, соответствуют результаты данного Проекта**

Технологии создания электронной компонентной базы и энергоэффективных световых устройств.

**3.16. Основное направление технологической модернизации экономики России, которому, по мнению исполнителей, соответствуют результаты данного**

## Проекта

не очевидно

*Подпись руководителя проекта*

**Форма 510. Заявка на 2016 год**

### **10.1. Номер Проекта**

14-02-01236

### **10.2.1. Основной код классификатора**

02

### **10.2.2. Дополнительные коды классификатора**

02-202

### **10.3. Ключевые слова**

квазиодномерные проводники, пайерлсовский переход, волна зарядовой плотности, фотопроводимость, энергетическая структура

### **10.4. Задачи Проекта, которые должны быть решены в 2016 году, их связь с целью и задачами Проекта (перечислить задачи и указать распределение исполнителей по задачам Проекта на 2016 год)**

Основными задачами проекта на весь срок являются:

1. Синтез различных квазиодномерных соединений. Основное внимание – к синтезу кристаллов  $TaS_3$  с различными структурными изменениями и изготовление из них образцов (в том числе и ультратонких) с контактами. К возможным изменениям структуры относятся: легирование образца (изменение концентрации и типа примесей), изменение кристаллографической модификации, продольное растяжение образца, изменение изотопного состава, а также создание искажений структуры, в частности, создание ростовых дефектов.

2. Экспериментальное исследование изменений коллективной и одночастичной проводимостей в полученных объектах с целью выяснения природы низкотемпературной омической проводимости.

3. Экспериментальное исследование особенностей фотопроводимости в образцах с различными структурными изменениями с целью поиска неодночастичного вклада в фотопроводимость.

Основные задачи на 2016:

**Технологическая часть.**

1. Разработать технологию внесения ростовых дефектов в кристаллы TaS<sub>3</sub> при синтезе и вырастить кристаллы TaS<sub>3</sub> с различной концентрацией ростовых дефектов (Исполнители: А.М. Никитина, В.Е. Минакова).

2. Вырастить чистые кристаллы обеих модификаций TaS<sub>3</sub> и обеих фаз NbS<sub>3</sub> (Исполнители: А.М. Никитина, В.Е. Минакова, В.Ф. Насретдинова).

3. Продолжить изготовление структур с областями фиксированной деформации (разной величины) и без нее и образцов с регулируемой деформацией (Исполнители: А.Н. Талденков, С.Г. Зыбцев).

**Экспериментальная часть.**

1. Приступить к исследованиям темновой проводимости (омической и нелинейной) и фотопроводимости в образцах с ростовыми дефектами (Исполнитель: В.Е. Минакова).

2. Продолжить исследования спектральных зависимостей фотопроводимости (в том числе при различных поляризациях света) в различных имеющихся у нас квазиодномерных соединениях с ВЗП (Исполнитель: В.Ф. Насретдинова).

3. Продолжить исследования темновой низкотемпературной проводимости (омической и нелинейной) и фотопроводимости в образцах с продольным растяжением (Исполнители: В.Е. Минакова, С.Г. Зыбцев).

4. Провести расчеты из первых принципов энергетической структуры, спектров оптического поглощения и поверхностей Ферми в NbS<sub>3</sub> в GW приближении (Исполнитель: В.В. Павловский).

**10.5. Ожидаемые в конце 2016 г. научные результаты**

К концу 2016 г. ожидаем получить следующие научные результаты:

1. Синтезировать кристаллы *o*-TaS<sub>3</sub> с ростовыми дефектами и исследовать темновую проводимость (омическую и нелинейную) и фотопроводимость этих образцов.

2. Исследовать температурные и спектральные (в том числе при различных поляризациях света) зависимости фотопроводимости в NbS<sub>3</sub> (II).

**10.6. Объем финансирования на 2016 г. запрашиваемый в Фонде**

800000 руб.

**10.6.1. Перечень оборудования и материалов, которые необходимо дополнительно приобрести, изготовить или отремонтировать для успешного вы-**

**полнения Проекта; обосновать необходимость его приобретения и указать приблизительную стоимость**

Для успешного выполнения проекта необходимо следующее оборудование и материалы:

1. Мультиметр прецизионный 6,5-разрядный "Keithley 2000" для модернизации установки по измерению фотопроводимости – 100000 руб.
2. Весы аналитические (точность 0.0001 г) для взятия навесок при синтезе квазиодномерных проводников (замена сломавшихся весов) – 70000 руб.
3. Два термодатчика измерителя температуры с USB выходом для автоматизации технологического процесса – 20000 руб.
4. Принтер, картриджи к нему и другие мелкие расходы – 20000 руб.
5. Кварцевые ампулы и расходные материалы для синтеза квазиодномерных проводников – 60000 руб.
6. Жидкие газы (гелий, азот) для низкотемпературных измерений – 100000 руб.

**10.6.2 Перечень командировок (в том числе зарубежных), необходимых для выполнения проекта. Обосновать их необходимость и указать приблизительную стоимость**

Для успешного выполнения проекта необходимы следующие командировки:

1. Участие в Международной Конференции по науке и технологии синтетических металлов International Conference On The Science And Technology Of Synthetic Metals – ICSM2016 (Гуанчжоу, Китай) – одна из основных международных конференций по синтезу и физике квазиодномерных проводников; 1 человек; ориентировочная стоимость – 100000 руб.
2. Участие в 2-х российских конференциях; 1 человек; ориентировочная стоимость – 20000 руб.

**10.6.3. Планируемое количество участников Проекта в 2016 году (цифрой)**

6

**10.7. Полный список членов коллектива на 2016 год**

1. Минакова Валерия Евгеньевна, старший научный сотрудник
2. Насретдинова Венера Фатиховна, младший научный сотрудник
3. Никитина Анна Мейровна, ведущий технолог
4. Зыбцев Сергей Григорьевич, старший научный сотрудник

5. Талденков Александр Николаевич, старший научный сотрудник

6. Павловский Валерий Владимирович, научный сотрудник

*Подпись руководителя проекта*