

ТИНЧУРИНСКИЕ ЧТЕНИЯ – 2023 «ЭНЕРГЕТИКА И ЦИФРОВАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ»

Международная молодежная научная конференция
(Казань, 26-28 апреля 2023 г.)

Материалы конференции

В трех томах

ТОМ 1



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Казанский государственный энергетический университет»**

**ТИНЧУРИНСКИЕ ЧТЕНИЯ – 2023 «ЭНЕРГЕТИКА И
ЦИФРОВАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ»**

Международная молодежная научная конференция
(Казань, 26-28 апреля 2023 г.)

Электронный сборник статей по материалам конференции

В трех томах

ТОМ 1

*Под общей редакцией ректора КГЭУ
Э. Ю. Абдуллазянова*

Казань 2023



Таким образом, разработанный подход к изучению данных элементного анализа позволяет сделать выводы о структурных особенностях зон связывания, в частности, уточнить информацию о наиболее предпочтительных для связывания с данными катионами видах «egg-box» ячеек и предположить характер связывания альгинатных димеров в этих зонах.

Источники

1. Makarova A.O., Derkach S.R., Kadyirov A.I., Ziganshina S.A., Kazantseva M.A., Zueva O.S., Gubaidullin A.T., Zuev Y.F. Supramolecular Structure and Mechanical Performance of κ -Carrageenan–Gelatin Gel // *Polymers*. 2022. V. 14(20). P. 4347.
2. Makshakova O.N., Bogdanova L.R., Makarova A.O., Kusova A.M., Ermakova E.A., Kazantseva M.A., Zuev Y.F. κ -Carrageenan Hydrogel as a Matrix for Therapeutic Enzyme Immobilization // *Polymers*. 2022. V. 14(19). P. 4071.
3. Макарова А.О., Зуева О.С. Богданова Л.Р. и др. Биотехнологические приемы использования полисахаридных гидрогелей для доставки витаминов и диагностических маркеров // *Бутлеровские сообщения*. 2021. Т. 10. С. 147–155.
4. Kong C., Zhao X., Li Y., Yang S., Chen Y.M., Yang Z. Ion-Induced Synthesis of Alginate Fibroid Hydrogel for Heavy Metal Ions Removal // *Frontiers in Chemistry*. 2020. V. 7. P. 905.
5. Agulhon P., Markova V., Robitzer M., Quignard F., Mineva T. Structure of Alginate Gels: Interaction of Diuronate Units with Divalent Cations from Density Functional Calculations // *Biomacromolecules*. 2012. V. 13(6). P. 1899–1907.

УДК 539.143.4

ОСОБЕННОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ДИАГРАММЫ В АМОРФНОЙ ФАЗЕ АУРИПИГМЕНТА As_2S_3

Д.С. Китанин¹, Е.Д. Малаева²

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доцент А.И. Погорельцев

^{1,2} ФГБОУ ВО «КГЭУ», г. Казань, Россия

¹zak7235@mail.ru, ²malaeBa_@Ba01@mail.ru

В настоящей работе представлены результаты построения энергетической диаграммы аморфной фазы аурипигмента. Были выявлены явные отличия в энергетических диаграммах для кристаллической и аморфной фаз: величина щели LUMO – НОМО для аморфного состояния больше, что может связано с наличием



третьего состояния. Расчеты проводились с опорой на экспериментально определенные квадрупольные параметры. Проведено обсуждение полученных результатов.

Ключевые слова: аурипигмент, халькогенидные полупроводники, кристаллическая фаза, аморфная фаза, градиент электрического поля (ГЭП), ядерный квадрупольный резонанс (ЯКР), квадрупольные параметры, неэквивалентные положения ядер, энергетическая диаграмма, щель LUMO – HOMO, частота резонанса, спектр.

FEATURES OF THE ENERGY DIAGRAM IN THE AMORPHOUS PHASE OF THE As_2S_3 AURIPIGMENT

D.S. Kitanin¹, E.D. Malaeva²

^{1,2} KSPEU, Kazan, Russia

¹zak7235@mail.ru, ² mala@Ba_@Ba01@mail.ru

This paper presents the results of constructing an energy diagram of the amorphous phase of an auripigment. There were obvious differences in the energy diagrams for the crystalline and amorphous phases: the LUMO – HOMO gap for the amorphous state is larger, which may be due to the presence of a third state. Calculations were carried out based on experimentally determined quadrupole parameters. The results were discussed.

Keywords: auripigment, chalcogenide semiconductors, crystalline phase, amorphous phase, electric field gradient (GAP), nuclear quadrupole resonance (NQR), quadrupole parameters, nonequivalent positions of nuclei, energy diagram, LUMO – HOMO gap, resonance frequency, spectrum.

Халькогенидные стеклообразные полупроводники, к которым относится аурипигмент (orpiment) As_2S_3 широко применяются в современных технологиях - при изготовлении солнечных батарей, оптических устройств памяти и т.п.

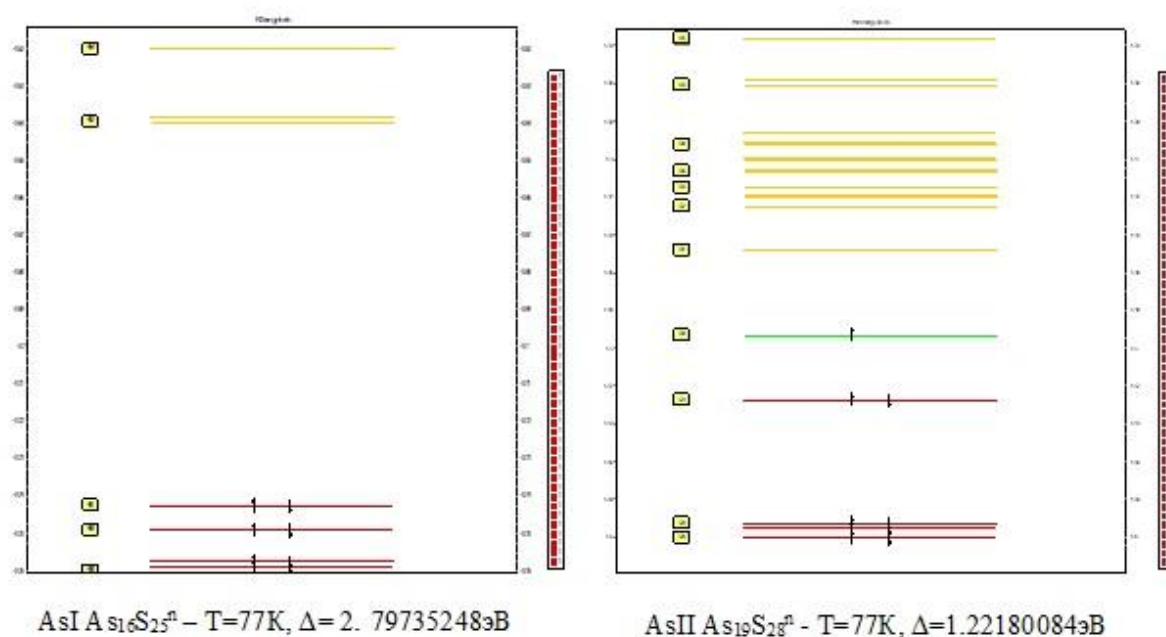
Аурипигмент As_2S_3 легко получается искусственным путем сплавления стехиометрических количеств As и S, однако полученный продукт является аморфным соединением и обладает свойством стекла. Образцы естественного происхождения наоборот, как правило, имеют кристаллическую структуру. Кристаллы аурипигмента имеют моноклинную ячейку (пространственная группа $P2_1/n$) с параметрами $a = 11.46$, $b = 9.57$, $c = 4.22 \text{ \AA}$ $\beta = 90.5^\circ$ [1].

В работе [1] были представлены результаты ЯКР исследования аморфной фазы аурипигмента. Здесь в отличие от кристаллического состояния [2] наблюдается одна широкая линия в диапазоне частот 65 –

80МГц с уширением в область высоких частот. Мы выполнили аппроксимацию спектра из работы [1] тремя линиями гауссовой формы. Было обнаружено третье состояние на частоте $\nu_3=77.8\text{МГц}$, которое можно отнести к аморфному состоянию.

Мы провели исследование энергетических диаграмм в аморфной фазе аурипигмента на кластерах AsI $\text{As}_{16}\text{S}_{25}^{\text{n}}$ и AsII $\text{As}_{19}\text{S}_{28}^{\text{n}}$. Анализ величины щели LUMO – HOMO приводит к следующим результатам (см. рисунок): кластер AsI $\text{As}_{16}\text{S}_{25}^{\text{n}}$ – $T=77\text{K}$, $\Delta E = 2.79735248\text{эВ}$; кластер AsII $\text{As}_{19}\text{S}_{28}^{\text{n}}$ – $T=77\text{K}$, $\Delta E = 1.22180084\text{эВ}$. В качестве примера на рисунке приведены энергетические диаграммы для кластеров AsI $\text{As}_{16}\text{S}_{25}^{\text{n}}$ и AsII $\text{As}_{19}\text{S}_{28}^{\text{n}}$.

Согласно работам [3,4] величина оптической энергетической щели в аурипигменте, находящемся в кристаллическом состоянии составляет $\Delta E = 2,53\text{эВ}$. В работе [5] представлены результаты исследования аморфных пленок аурипигмента. Рассчитанная оптическая ширина запрещенной зоны, равна $2,18\text{эВ}$ для As₂S₃.



Энергетические диаграммы в аморфной фазе аурипигмента

В связи с этим, полученные нами значения ширины запрещенной зоны вполне коррелируют с литературными данными, особенно для кластера AsI $\text{As}_{16}\text{S}_{25}^{\text{n}}$ (щель LUMO – HOMO как правило больше по сравнению с реальными значениями). Что касается кластера AsII $\text{As}_{19}\text{S}_{28}^{\text{n}}$, то здесь по-видимому нужна корректировка параметров кластера. В



настоящее время в данном направлении нами проводятся соответствующие исследования.

Источники

1. P. Craig Taylor. NQR in Amorphous Semiconductors. Zeitschrift fur Naturforschung, 1996, 51a, с. 603-610
2. И. Н. Пеньков, И. А. Сафин, Ядерный квадрупольный резонанс в аурипигменте, Доклад АН СССР, 1964, том 156, номер 1, 139–141
3. Булах А.Г. Минералогия: учебник для студ. Учреждений высш. проф. образования / М. Издательский центр «Академия», 2011.
4. Д.Ю. Пушаровский. Структура и свойства кристаллов М.: ГЕОС, 2022
5. Нгуен Тхи Ханг, Козик В.В., Козюхин С.А. Аморфные тонкие пленки $As_2x_3(X=S, Se)$, полученные методом спин-коатинга раствора // Аморфные и микрокристаллические полупроводники сборник трудов международной конференции, 2018 Санкт-Петербург

УДК 524.882

ВЛИЯНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ХОКИНГА НА КОСМОС.

Е.О. Ефимов¹, К.Р. Медведев²

^{1,2}ФГБОУ ВО «КГЭУ», г. Казань, Республика Татарстан

¹egorefimov189@gmail.com, ²kirkmevded228@gmail.com

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доцент А.И. Погорельцев

Излучение Хокинга — уникальное явление в физике, возникающее на горизонте событий черной дыры. Впервые он был предложен Стивеном Хокингом в 1974 году и с тех пор стал предметом интенсивных исследований и дискуссий. Явление основано на концепции квантовой механики и общей теории относительности и является важным шагом на пути к объединению этих двух теорий.

Ключевые слова: Хокинг, черная дыра, космос, квантовая механика.

INFLUENCE OF HAWKING RADIATION ON SPACE.

E.O. Efimov¹, K.R. Medvedev²

^{1,2}KSPEU, Kazan, Republic of Tatarstan

¹egorefimov189@gmail.com, ²kirkmevded228@gmail.com



Научное издание

ТИНЧУРИНСКИЕ ЧТЕНИЯ – 2023 «ЭНЕРГЕТИКА И ЦИФРОВАЯ
ТРАНСФОРМАЦИЯ»

Международная молодежная научная конференция

(Казань, 26-28 апреля 2023 г.)

Электронный сборник статей по материалам конференции

В трех томах

Том 1

Под общей редакцией ректора КГЭУ Э. Ю. Абдуллазянова

Авторская редакция

Корректор *Д.А. Ганеева*

Компьютерная верстка *Д.А. Ганеевой*

Дизайн обложки *Ю. Ф. Мухаметшиной*

КГЭУ

420066, Казань, Красносельская, д. 51



Ежегодная конференция проводится в память первого ректора КГЭУ – Фореля Закировича Тинчурина (1926–2002).

Тинчури́н Форель Закирович – инженер-механик, профессор, в 1952–1976 годах занимался научно-педагогической работой в Казанском авиационном институте. В 1976 году стал проректором Казанского филиала Московского энергетического института, а в 1985 году – его ректором, в этой должности пребывал до 1994 года.

В память талантливого ученого, педагога и организатора высшего образования в Республике Татарстан – Фореля Закировича Тинчурина – заложена традиция проведения ежегодной международной конференции «Тинчуринские чтения».

В 2023 году Казанский государственный энергетический университет отмечает свой юбилей. За 55 лет университет прошел огромный путь и стал одним из крупнейших и авторитетнейших ВУЗов, признанных как в России, так и за рубежом. Воспитано несколько поколений высококлассных специалистов для отрасли, многие из которых стали руководителями предприятий.

На базе университета созданы все условия для успешной подготовки специалистов в области энергетики: специализированные кафедры; множество учебно-научных лабораторий созданных по последним требованиям отрасли; функционирующий процесс тренажер-симулятор, моделирующий работу энергоблока с одним из самых современных и безопасных реакторов; учебный полигон «Подстанция 110/10 кВ»; современные общежития.

По объему и уровню выполняемых научных работ КГЭУ является одним из лучших вузов Российской Федерации.

ISBN 978-5-89873-630-9



9 785898 736309