

УДК 539.143.4

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ДИАГРАММЫ В АУРИПИГМЕНТЕ As_2S_3

Китанин Д.С., Мухлина Е.С., Николаев К.В., Погорельцев А.И., Матухин В.Л.,
Шмидт Е.В.

*Казанский государственный энергетический университет
420066, г. Казань, ул. Красносельская, д. 51
e-mail: zak7235@mail.ru*

Спектр ЯКР $75As$ измеренный ранее при температурах 77 и 300 К состоял из двух резонансных линий, частоты которых равны 70.336, 69.537 и 72.804, 71.942 МГц для температур 77 и 300 К соответственно. Нами была выполнена серия расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием различных обменных, корреляционных и гибридных функционалов. Было найдено хорошее соответствие экспериментальным данным: кластер AsI $As_{16}S_{25}n$ – $T = 300K$, = 69.54 МГц, $n = 1$, базис $sto(3)$, функционал BHHLYP; $T = 77 K = 70.3358$ МГц, $n = 4$, базис $sto(3)$, функционал BHHLYP; кластер AsII $As_{19}S_{28}n$ – $T = 300 K$, = 71.95 МГц, $n = 0$, базис $sto(4)$, функционал B3LYP1,5; $T = 77 K$, = 72.81 МГц, $n = 12$, базис $sto(4)$, функционал B3LYP1,5.

В настоящей работе основное внимание было уделено анализу энергетических диаграмм исследуемых кластеров. В частности, анализ величины щели LUMO-НОМО приводит к следующим результатам: кластер AsI $As_{16}S_{25}n$ – $T = 300 K$, $\Delta = 0.3265 eV$; $T = 77 K$, $\Delta = 0.9496848 eV$; кластер AsII $As_{19}S_{28}n$ – $T = 300 K$, $\Delta = 0.043538 eV$; $T = 77 K$, $\Delta = 0.01088 eV$. Обращает на себя внимание, в частности, тот факт, что величины щелей очень маленькие. Более того, характер изменения величин щелей с температурой различен для двух исследуемых неэквивалентных положений AsI и AsII – если в первом случае наблюдается уменьшение щели с повышением температуры, что типично для полупроводника, то во втором случае величина щели несколько растет, что характерно для металлов. На наш взгляд наблюдаемые особенности могут быть связаны с аномальной зависимостью интенсивности ЯКР.