

Настройка модели для исследования черного фосфора с использованием теории функционала электронной плотности

Скачкова В. А. ¹,

Зеленина М. С. ²

2017

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь

Ключевые слова: черный фосфор, теория функционала электронной плотности, слоистый материал.

Аннотация: Материалы посвящены настройке модели черного фосфора с использованием теории функционала электронной плотности и выбраны оптимальные входные данные для дальнейших исследований свойств слоистого черного фосфора.

Источник публикации: Интеллектуальные и сенсорные системы – 2016: Сборник научных трудов по материалам Республиканской студенческой научно-технической конференции [Электронный ресурс]. – 2016. – Режим доступа: <http://rep.bntu.by/handle/data/24569>.

Интернет-ссылка на статью: <http://rep.bntu.by/handle/data/24569>.