

## Компьютерное моделирование структуры и исследование свойств гипотетического кристалла RbInS<sub>2</sub>

**Басалаев Ю.М.**, д.ф.-м.н., профессор

Кемеровский государственный университет, г. Кемерово, Россия

Российский государственный аграрный университет - МСХА им. К.А. Тимирязева, г. Москва, Россия

**Басалаева О.Г.**, к.филос.н., доцент

Кемеровский государственный медицинский университет, г. Кемерово, Россия

**Аннотация.** В рамках теории функционала плотности выполнено компьютерное моделирование кристаллической структуры и электронного строения кристалла RbInS<sub>2</sub> с решеткой халькопирита. Вычислен колебательный спектр оптических частот. Исследованы упругие свойства. Установлено, что кристалл RbInS<sub>2</sub>

Автор: Басалаев Ю.М., Басалаева О.Г.

23.03.2024 22:41 - Обновлено 23.03.2024 22:48

---

2

является пластичным прямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 2.78 эВ.

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, пакет программ CRYSTAL, халькопирит, модуль упругости, RbInS

2

.

По мере развития науки метод моделирования становится одним из основных способов получения знаний о скрытой сущности вещей и событий. Исследователи по-разному оценивают и определяют значение метода моделирования, но неизменным остается понимание, что его выбор – одно из обязательных средств получения истинного знания [4, с.27].

Применение подобных средств обусловлено возможностью передать основные существенные черты объектов и процессов в их моделях [1, с.40].

...

*полный текст во вложении*

Автор: Басалаев Ю.М., Басалаева О.Г.

23.03.2024 22:41 - Обновлено 23.03.2024 22:48

---