

PRZEWIDYWANIE STRUKTURY KRystalicznej NANODRUTÓW Z UŻYCIEM Obliczeń ewolucyjnych

Tomasz Tarkowski, rozprawa doktorska

Streszczenie: Praca omawia zastosowanie algorytmu genetycznego w zagadnieniu przewidywania struktury krystalicznej. Przedstawiono elementy teorii funkcjonału gęstości, teorię algorytmów genetycznych wraz z implementacją w języku C++ oraz rezultaty strojenia algorytmu genetycznego z użyciem funkcji testowych. Zaprezentowaną wiedzę użyto do wykonania strukturalnych obliczeń ewolucyjnych w przypadku monoatomowych nanodrutów złożonych z atomów boru z komórką elementarną o rozmiarze do 8 atomów.

Słowa kluczowe: algorytm genetyczny, funkcje testowe, programistyczne biblioteki naukowe, przewidywanie struktury krystalicznej, teoria funkcjonału gęstości