

Optymalizacja własności mechanicznych dwufazowych płaskich materiałów opartych na silicenie z wykorzystaniem algorytmu kwantowo-ewolucyjnego.

Adam Mrozek, AGH i Waław Kuś, Politechnika Śląska.

Tematyka referatu dotyczy zastosowania algorytmu kwantowo-ewolucyjnego do poszukiwania periodycznych, dwufazowych modeli struktur silicenu o żądanych własnościach mechanicznych - sztywnościach w kierunkach zig-zag i armchair.

Optymalizacji podlegał rozmiar prostokątnej wyspy z fazy LHDS (Large Honeycomb Dumbbell Silicene), otoczonej silicenem typu LBS (Low-Buckled Silicene). Do modelowania oddziaływań międzyatomowych użyto potencjału ReaxFF (Reactive Force Field) oraz statyki molekularnej.

Zachowanie otrzymanych w wyniku procesu optymalizacji modeli struktur atomowych w warunkach dużych obciążeń i odkształceń zbadano podczas symulacji testu rozciągania metodą dynamiki molekularnej.