

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ

Кафедра вычислительной математики

Аннотация к дипломной работе

Оптимизация параметров эмпирического потенциала

Суббота Дарья Евгеньевна

Научный руководитель: доцент кафедры вычислительной математики
ФПМИ, кандидат физико-математических наук Белько Виктор Иванович

Минск, 2020

РЕФЕРАТ

Дипломная работа, 37 страниц, 9 источника, 3 рисунка, 1 таблица, 4 приложения

МЕЖАТОМНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ, МИНИМИЗАЦИЯ ФУНКЦИОНАЛА,
МЕТОД ПАУЭЛЛА, МЕТОД ГРАНУЛЯРНОГО РАДИАЛЬНОГО ПОИСКА

Объект исследования – методы и алгоритмы моделирования физики полупроводников.

Цель работы – оптимизация параметров эмпирического межатомного потенциала.

Методы исследования – методы минимизации функционалов.

Результаты работы: выведены параметры межатомного эмпирического потенциала, результаты тестовых расчетов.

ABSTRACT

Graduation work, 37 pages, 9 sources, 3 figures, 1 table, 4 applications.

INTERATOMIC POTENTIAL, MININIZATION OF FUNCTIONAL, POWELL
METHOD, GRANULAR RADIAL SEARCH

Object of research – modeling methods and algorithms in physics of semiconductors.

Purpose of the work – optimization of parameters for an empirical interatomic potential.

Methods of research – m minimization methods for functionals.

Results of the work: the parameters of the EDIP interatomic empirical potential and the results of test calculations.