

# ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АНАЛИЗ ДАННЫХ

## ГЕОМЕТРИЧЕСКИ ОБОСНОВАННЫЙ МЕТОД ФОРМИРОВАНИЯ АТОМНЫХ КЛАСТЕРОВ МОРСА БОЛЬШИХ РАЗМЕРОВ

А.Н. Коварцев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва, Самара, Россия

### Аннотация

В статье предлагается геометрически обоснованный метод построения начальной конфигурации полной икосаэдрической структуры атомного кластера, обеспечивающий нахождение глобального минимума энергии кластера за счёт однократного выполнения процедуры локальной оптимизации. Основу метода составляет предложенный алгоритм послойного размещения центров атомов кластера, позволяющий формировать структурные конфигурации, часто встречающиеся среди кластеров с глобально-минимальной энергией взаимодействия его атомов. Данный алгоритм предоставляет возможность строить пространственные конфигурации плотной упаковки шаров при формировании икосаэдрических и декаэдрических структур, а также полных икосаэдров с большим количеством атомов. С помощью предложенного метода достигнуты минимальные значения энергии атомных кластеров Морса больших размеров ( $N=817, 923$  и  $1415$ ), которые являются рекордными для кластеров Морса с  $\rho=6$ .

**Ключевые слова:** атомная и молекулярная физика, численные приближения и анализ, глобальная геометрическая оптимизация, кластеры Морса.

**Цитирование:** Коварцев, А.Н. Геометрически обоснованный метод формирования атомных кластеров Морса больших размеров / А.Н. Коварцев // Компьютерная оптика. – 2017. – Т. 41, № 1. – С. 118-125. – DOI: 10.18287/2412-6179-2017-41-1-118-125.

### Введение

В последнее время значительно вырос интерес к методам получения сверхмелкодисперсных кластерных структурных материалов (наночастиц).

Изучение механизмов структурирования самих наночастиц связано с тем, что образование функциональных структур из нанокристаллических кластеров позволяет придавать материалам новые электрические, магнитные и оптические свойства [1]. В частности, результаты последних исследований показали, что многие атомные кластеры обладают яркой люминесценцией в видимой области спектра [2]. Это делает молекулярные кластеры перспективными с точки зрения практического применения в устройствах фотоники: люминесцентных сенсорах, солнечных батареях, светодиодах белого свечения и т.д. Знание деталей формирования кластерной структуры является определяющим для повышения эффективности различных способов производства нанокластеров.

Основной задачей данного направления является обнаружение такой геометрической структуры атомного кластера, иными словами, *конформации* кластера, которая соответствует минимуму энергии взаимодействия входящих в него атомов. В более простом случае конформационного анализа химическая связь между атомами не учитывается. В частности, для кластеров Морса рассматриваются только парные взаимодействия атомов кластера, которые описываются потенциальной функцией:

$$v(r_{ij}) = e^{\rho(1-r_{ij})} (e^{\rho(1-r_{ij})} - 2), \quad (1)$$

где  $r_{ij}$  – расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ;  $\rho$  – параметр, расширяющий или сужающий потенциальную «яму» парных взаимодействий атомов в кластере Морса [5]. Обычно  $\rho$  принадлежит диапазону от 3 до 14.

Энергию взаимодействия всех атомов кластера можно вычислить как сумму энергий парных взаимодействий

$$v(X) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ (i \neq j)}}^N v(r_{ij}), \quad (2)$$

где  $X = (x_1, \dots, x_N)'$ ,  $x_i \in R^3$  – координаты центров атомов кластера.

На рис. 1 показаны графики потенциальной функции Морса.

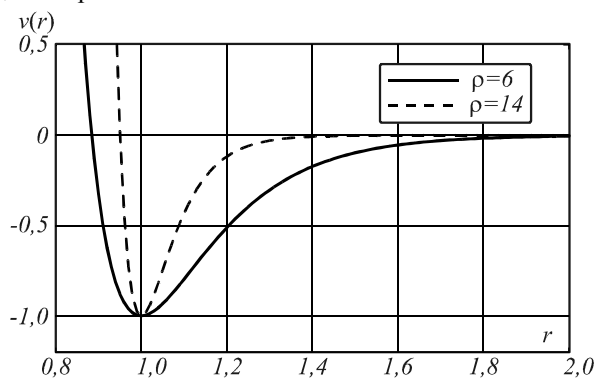


Рис. 1. Потенциал Морса парного взаимодействия

Как видно из рисунка, функция зависит от расстояния между парами атомов и не является выпуклой. Как показали исследования [5], результирующая целевая функция (2), полученная при суммировании вклада энергий парных взаимодействий, представляет собой невыпуклую мультимодальную функцию пространственных координат  $N$  атомов. Таким образом, проблема поиска оптимальных конформаций атомных кластеров сводится к задаче глобальной оптимизации (ГО) потенциальной функции (2).

К сожалению, прямые методы глобальной оптимизации, дающие точное решение задачи оптимизации,

ции, способны находить решение (даже с использованием современных суперкомпьютеров) для функций с числом 20 – 30 переменных [3], в то время как в задачах ГО атомных кластеров участвует более 900 оптимизируемых переменных.

В сложившейся ситуации приходится разрабатывать эвристические алгоритмы оптимизации, использующие разнообразную дополнительную информацию об объекте исследования [4].

Одна из первых эвристик, применяемых при решении задачи ГО кластерных структур, заключается в использовании геометрических свойств известных атомных кластеров [5, 23]. Например, для кластеров Морса было замечено, что расположение атомов в оптимальных конформациях тяготеет к симметричной сферической форме [6]. Использование этой информации привело к созданию **геометрически обоснованных** методов глобальной оптимизации кластеров Морса. К идее учёта геометрических структурных свойств кластера для минимизации его потенциальной энергии впоследствии не раз возвращались [7–10]. Так, в работе [7] в качестве ядер начальных конформаций кластеров использовались икосаэдрические, додекаэдрические или гранецентрированные кубические структуры.

Ещё большую группу методов оптимизации кластеров образуют **локально-стохастические** методы, использующие идею метода «basin-hopping» [5]. Основу этих методов составляет представление о том, что для потенциальной функции (2) локальные экстремумы собираются в ограниченном количестве так называемых «бассейнов», в каждом из которых «воронки» локальных минимумов расположены настолько близко друг к другу, что за счет случайных возмущений координат атомов кластера возможен постепенный переход от локальных экстремумов к глобальному. Эта идея многократно совершенствовалась [11–14], что в конечном итоге позволило найти глобальные эвристики для кластеров больших размеров [13].

И, наконец, следует упомянуть группу популяционных алгоритмов глобальной оптимизации [15–17], которые в отдельных случаях значительно повысили эффективность эвристических алгоритмов ГО атомных кластеров Морса.

В данной статье рассматривается геометрически обоснованный метод глобальной оптимизации атомных кластеров Морса больших размеров.

### 1. Плотная упаковка атомов кластера

Задача формирования атомных кластеров минимальной потенциальной энергии так или иначе связана с проблемой плотной упаковки шаров [6, 24]. Для кластеров наиболее важными факторами являются: сферичность формы конформации и достижимость как можно более плотной «упаковки» атомов.

Для жестких шаров наибольшая плотность достигается для гранецентрированной кубической решётки. В этом случае шары заполняют чуть больше 74 % объёма пространства [18]. Однако для «мягких» атомов кластера Морса, когда атомы могут частично

«вминаться» друг в друга (см. левую ветку графика потенциала парного взаимодействия на рис. 1), более плотные упаковки формируются для икосаэдрических и додекаэдрических сеток [5, 7, 21, 23].

Анализ кластерных структур из базы данных Кембриджского университета [19] и её расширения [20] для  $\rho \geq 6$  с числом атомов  $12 < N < 250$  показал, что представленные атомные структуры с глобально-оптимальным потенциалом энергии при  $\rho = 6$  в подавляющем большинстве случаев имеют икосаэдрическую или ей подобную структуру. Более того, для магических чисел  $N = 55, 147, 309, 561$  конформации имеют форму полного правильного икосаэдра. В то же время при  $\rho = 14$  преобладают додекаэдрические и икосаэдрические структуры, хотя нередко встречаются гранецентрированные решетки и плотноупакованные конфигурации (close-packed) [19, 20].

Одним из важных результатов, выявленных в ходе анализа атомных кластеров Морса с глобально-оптимальным потенциалом энергии, является тот факт, что кластеры можно развернуть вдоль оси  $z$  таким образом, что их атомы будут образовывать «нечеткую» слоистую структуру. Под «нечетким» слоем в данном случае понимается расположение группы атомов (шаров) таким образом, чтобы их центры находились не на плоскости, а в достаточно «тонком» слое  $z_j \pm \Delta z_j$ .

Второе важное наблюдение заключается в том, что в проекции на плоскость  $xOy$  все выделенные слои в оптимальных кластерах образуют икосаэдрическую нерешётчатую упаковку. Назовём её икосаэдрической сеткой (см. рис. 2).

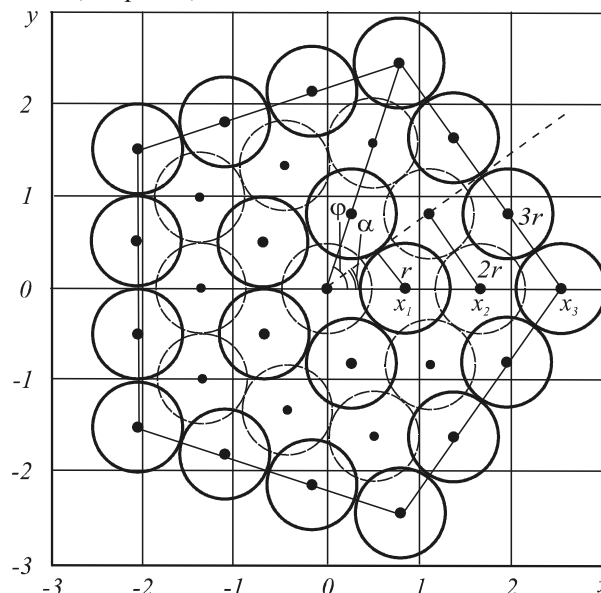


Рис. 2. Проекция на плоскость икосаэдрической нерешётчатой упаковки шаров

Эти два факта позволяют предложить более простой метод формирования полных правильных икосаэдров для кластеров любого размера, которые могут служить хорошими начальными приближениями для алгоритма локальной оптимизации, уточняющего конечные конформации кластеров.

В свою очередь, рекордные конформации, построенные для магических чисел, являются полезными ориентирами для формирования кластеров промежуточных размеров. Они могут быть построены либо «наращиванием» предшествующего полного икосаэдра, либо «разборкой» последующего. Построить икосаэдрическую сетку достаточно просто.

В центре упаковки располагается шар радиуса  $r$  (в нашем случае  $r=0,5$ ). Плоскость делится лучами, исходящими из начала координат, на 5 равных частей. Угол между лучами равен  $\phi=2\pi/5$ . Пусть  $\alpha=\phi/2=\pi/5$ . Далее будем располагать центры шаров по линиям правильных пятиугольников вокруг центрального шара. Причем для первого пятиугольника в каждом секторе размещается две половинки шаров (фактически один целый шар), для второго пятиугольника в каждом секторе – 4 половинки (2 целых шара) и т.д. В этом случае координаты шаров, расположенных на оси  $Ox$  ( $y=0$ ), для каждого из пятиугольника несложно вычислить по формуле

$$x_m = mr / \sin \alpha = mr / \sin(\pi/5), \tag{3}$$

где  $m$  – номер пятиугольника.

Координаты остальных шаров можно найти из геометрических соображений. Если центральный шар условно считать нулевым «пятиугольником», а каждый слой формировать объединением из пятиугольных конфигураций только с четными или нечетными номерами. Располагая слои в пространстве друг над другом, можно получить икосаэдрическую нерешетчатую упаковку шаров. В отличие от гранецентрированной кубической упаковки шаров (ГЦКУ), где каждый из слоёв размещается фактически над предыдущим слоем, слегка «утопая» в «углублениях» предыдущего слоя, в нашем случае чётные и нечётные слои почти наполовину «входят» друг в друга так, что нечётные слои находятся внутри чётных (см. рис. 3).

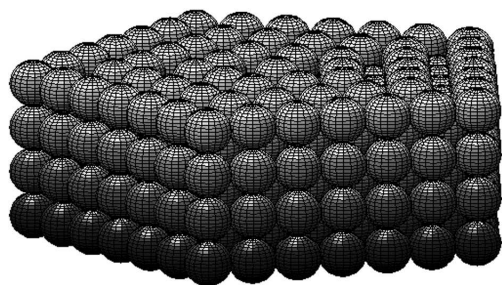


Рис. 3. Икосаэдрическая нерешетчатая упаковка шаров (4 чётных слоя и 3 нечётных)

### 2. Формирование пятиугольных конфигураций шаров

Практически все известные методы ГО атомных кластеров используют технику локальной оптимизации кластера из положения, близкого к оптимальному решению, поскольку сложность алгоритмов локальной оптимизации имеет полиномиальный характер. Из практики уже давно было замечено [2, 21, 23], что икосаэдрические структуры или близкие к ним являются хорошим начальным приближением для поиска гло-

бального минимума потенциальной энергии кластера методами локальной оптимизации. В данном параграфе опишем метод построения таких структур, основанный на послойном формировании всего кластера.

#### Определение координат центров шаров в секторе базового пятиугольника

Каждый слой конформации строится следующим образом.

Пусть  $\alpha=2\pi/5$ ;  $\beta=2\pi/10$  (рис. 4), и на каждой стороне размещается  $m$  шаров. Из (3) следует, что координату  $x_{m1}$  можно вычислить по формуле  $x_{m1}=mr/\sin(\pi/5)$ , а координаты центра первого шара равны  $X_{m1}=(x_{m1}, 0)$ . Несложно вычислить параметры  $a$  и  $b$  (рис. 4):

$$\begin{cases} a = 2r \sin \beta, \\ b = 2r \cos \beta, \end{cases}$$

и угол луча, проходящего через центр второго шара,  $\gamma_2 = \arctg(a/(x_{m1}-b))$ . По аналогии, угол луча  $k$ -го шара вычисляется по формуле:

$$\gamma_k = \arctg \frac{a(k-1)}{x_{m1} - (k-1)b}, k = 1, \dots, m.$$

Координаты центров шаров сектора расположены на пересечении лучей под углами  $\gamma_k$  и прямой, проходящей через центры  $l$ -го и  $m$ -го шара сектора. Несложно вычислить координаты центров шаров, лежащих на стороне пятиугольника  $X_{mk}=(x_{mk}, y_{mk})$ , где

$$\begin{cases} x_{mk} = x_{m1} \operatorname{tg}(\pi - \beta) / (\operatorname{tg}(\pi - \beta) - \operatorname{tg} \gamma_k), \\ y_{mk} = \operatorname{tg}(\pi - \beta)(x_{mk} - x_{m1}). \end{cases} \tag{4}$$

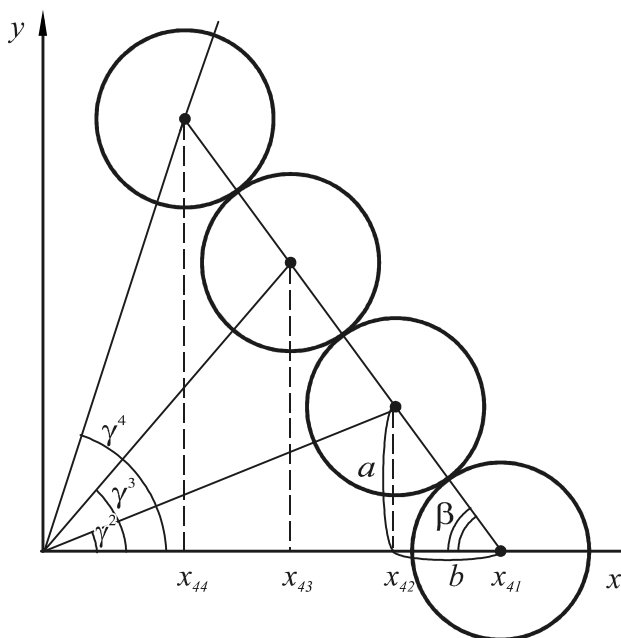


Рис. 4. Вычисление координат центров шаров в секторе базового пятиугольника

Координаты центров шаров остальных четырёх секторов определяются за счет четырёхкратного вращения первого сектора на угол  $\alpha$ . В базовом варианте пятиугольника на каждой его стороне располагается

$m$  шаров, а в вершинах пятиугольника располагается один шар. Такую конфигурацию обозначим  $I(m,1)$ . Структура, представленная на рис. 3, составлена из базовых конфигураций.

**Определение координат центров шаров в секторе деформированного пятиугольника**

Из базовых конфигураций пятиугольников невозможно построить икосаэдр. Необходимо деформировать структуру пятиугольника за счёт «переноса» части шаров с границы сектора в его вершину. Фактически это приводит к формированию неправильных десятиугольников.

В случае размещения в вершинах пятиугольника  $k$  шаров произведём следующие преобразования.

Для вершины, расположенной на луче  $Ox$ , когда  $k$  – нечётно, относительно  $k$ -й вершины, вершины с номерами  $k-1, \dots, 1$  расположим под центром  $k$ -го шара, т.е. перпендикулярно лучу (см. рис. 5) так, чтобы они касались друг друга только в одной точке. То же самое сделаем с шарами на втором луче пятиугольника, проходящем под углом  $\alpha$  по отношению к первому.

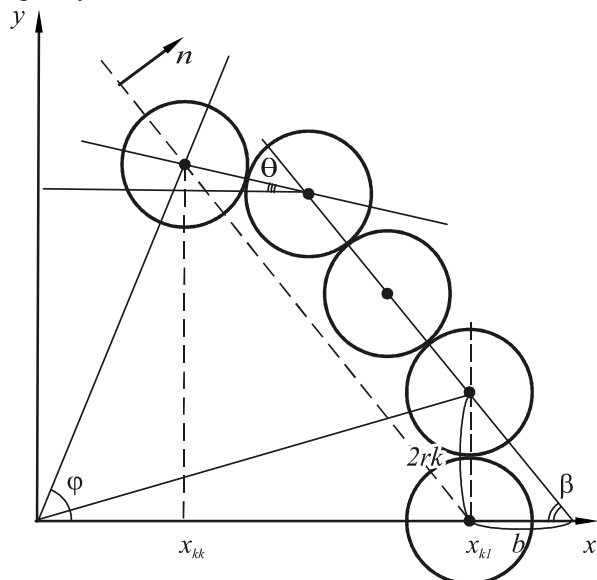


Рис. 5. Вычисление координат центров шаров в секторе деформированного пятиугольника

По построению  $\theta = \pi/2 - \alpha = \pi/10$ . Пусть в секторе содержится  $m$  шаров. Очевидно, что центр первого шара сектора после перемещения опустится ниже оси абсцисс. Следовательно, всю эту конфигурацию необходимо «поднимать» за счёт её перемещения в направлении вектора  $n$  (перпендикулярного к границе сектора шаров) на величину  $z$ .

$$\tilde{X}_{mj} = X_{mj} + zn. \tag{5}$$

Здесь  $n = (\cos(\pi/5); \sin(\pi/5))$ ,  $j = k, \dots, m-k$ .

Тогда, для  $j = 1, \dots, k$  центры шаров вычисляются по формулам:

$$\begin{cases} \tilde{x}_{mj} = \tilde{x}_{m,k+1}, \\ \tilde{y}_{mj} = \tilde{y}_{m,k+1} - 2r(k-j+1). \end{cases} \tag{6}$$

Координаты центров вершинных шаров второго луча для  $j = m-k, \dots, m$  определяются по формулам:

$$\begin{cases} \tilde{x}_{mj} = \tilde{x}_{m,m-k} - 2r(j-m+k)\cos\theta, \\ \tilde{y}_{mj} = \tilde{y}_{m,m-k} + 2r(j-m+k)\sin\theta. \end{cases} \tag{7}$$

В качестве естественного условия завершения процесса перемещения конфигурации шаров сектора выступает уравнение:

$$\tilde{x}_{m,1} = 0. \tag{8}$$

Решив уравнение (8) относительно  $z$  по формулам (5)–(7), можно определить координаты центров шаров первого сектора деформированного пятиугольника. Остальные координаты вычисляются по аналогии с базовым случаем.

Данная методика позволяет формировать деформированные «пятиугольники» с нечётным количеством шаров в его вершинах. Если вместо уравнения (8) использовать уравнение

$$\tilde{x}_{m,1} = r, \tag{9}$$

то получится деформированный «пятиугольник» с чётным количеством шаров в его вершинах.

Деформированные пятиугольники с заданным количеством шаров в его вершинах будем обозначать  $I(m, k)$ , где  $m$  – число шаров в секторе,  $k$  – в вершине. На рис. 6 представлены три возможных варианта «пятиугольников» для  $m=3$ :  $I(3,1)$  – базовая конфигурация (рис. 6а);  $I(3,2)$  и  $I(3,3)$  – деформированные пятиугольники с двумя и тремя шарами в вершинах (рис. 6б, в).

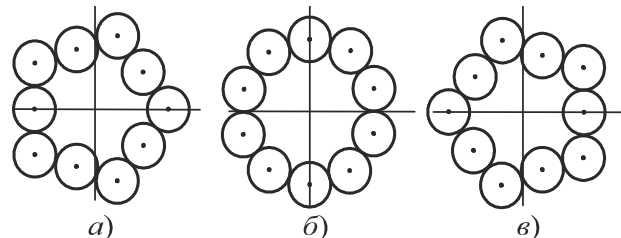


Рис. 6. Конфигурации пятиугольников: базового и деформированных

Из рис. 6 видно, что в последней конфигурации вершины пятиугольника поменялись местами с его сторонами. Этого можно добиться, повернув базовый пятиугольник на угол  $\alpha$ .

**3. Построение икосаэдрических плотных упаковок атомов кластера**

Предложенный способ построения различных конфигураций пятиугольников шаров даёт широкие возможности для формирования начальных приближений икосаэдрических плотных упаковок атомных кластеров. Например, схему структуры кластера из  $N=55$  атомов можно описать следующим образом:

$$S = [[I(1,1) : z = 2]; [I(2,1) : z = 1,5]; [I(1,1), I(3,1) : z = 1]; [I(2,1) : z = 0,5]; [I(1,1), I(3,2) : z = 0]; [I(2,2) : z = -0,5]; [I(1,1), I(3,3) : z = -1]; [I(2,2) : z = 1,5]; [I(1,1) : z = 2].$$

Меткой  $z$  здесь обозначена третья координата слоя в упаковке кластера. Слои представлены списками пятиугольников. На рис. 7 показаны слои икосаэдра кластера  $N=55$ , а на рис. 8 – его трёхмерная модель.

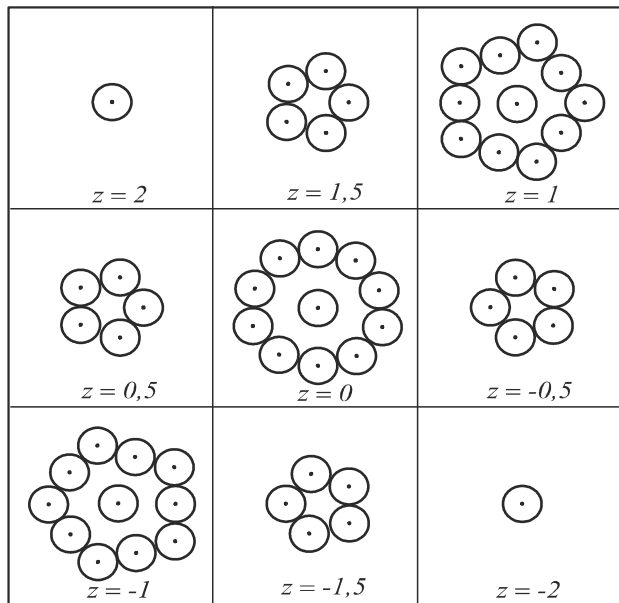


Рис. 7. Слои икосаэдра  $N=55$

Техника кодирования слоёв полного правильного икосаэдра достаточно проста. Например, для  $N=147$  конфигурация начального приближения строится следующим образом.

«Шапка» икосаэдра состоит из базовых конфигураций слоёв от одного шара до слоя, содержащего четыре шара на стороне пятиугольника:

$$S_1 = [[I(1,1) : z = 3]; [I(2,1) : z = 2,5]; [I(1,1), I(3,1) : z = 2]; [I(2,1), I(4,1) : z = 1,5]; [I(1,1), I(3,1) : z = 1]].$$

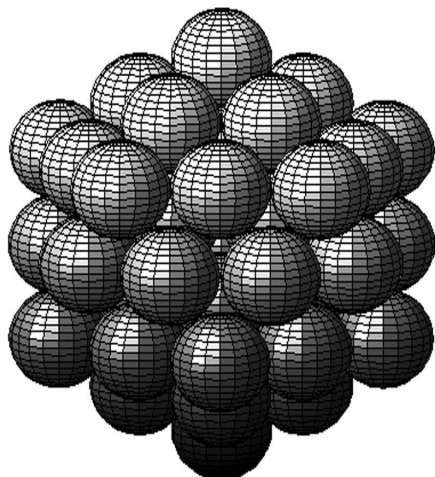


Рис. 8. Трёхмерная модель икосаэдра  $N=55$

Боковые грани икосаэдра содержат 10 треугольников с соответственно убывающим или возрастающим количеством шаров на грани от четырёх до одного и наоборот. Поэтому в слоях будем использовать деформированные «пятиугольники» с увеличивающимся на единицу числом шаров в вершинах пятиугольника.

$$S_2 = [[I(2,1), I(4,2) : z = 0.5]; [I(1,1), I(3,2) : z = 0]; [I(2,2), I(4,3) : z = -0.5]; [I(1,1), I(3,3) : z = -1]; [I(2,2), I(4,4) : z = -1.5]].$$

И, наконец, из фактически повернутых на угол  $\alpha$  базовых пятиугольников достроим нижнюю часть икосаэдра.

$$S_3 = [I(1,1), I(3,3) : z = -2]; [I(2,2) : z = -2,5]; [I(1,1) : z = -3]].$$

Весь икосаэдр описывается объединением слоёв:

$$S_{147} = S_1 \cup S_2 \cup S_3.$$

Следует отметить, что полные икосаэдры формируются только для  $\rho=6$ . Для  $\rho=14$  преобладают додекаэдрические структуры, начальные приближения которых формируются из базовых пятиугольников. Было замечено, что промежуточные конформации, расположенные между магическими числами при  $\rho=6$ , формируются за счёт «деформации» икосаэдра путём переноса части его атомов на места центров шаров внешних пятиугольников. Поскольку координаты центров шаров икосаэдрической сетки известны, это обстоятельство позволяет разрабатывать эвристический алгоритм формирования конформаций начальных приближений для кластеров с размерами между магическими числами.

С помощью предложенного метода при  $\rho=6$  удалось рассчитать начальные приближения полных икосаэдрических структур атомных кластеров Морса больших размеров для  $N=147, 309, 561, 923$  и  $1415$ . Полученные приближения были уточнены с помощью решателя *fminunc* пакета Optimization системы MATLAB [22]. Удивительно, что для кластера  $N=923$  (размерность задачи оптимизации 2769 переменных) решатель *fminunc* нашёл глобальный минимум потенциальной энергии кластера на обычном персональном компьютере за 18 часов. На рис. 9 представлена трёхмерная модель оптимального кластера Морса  $N=923$ .

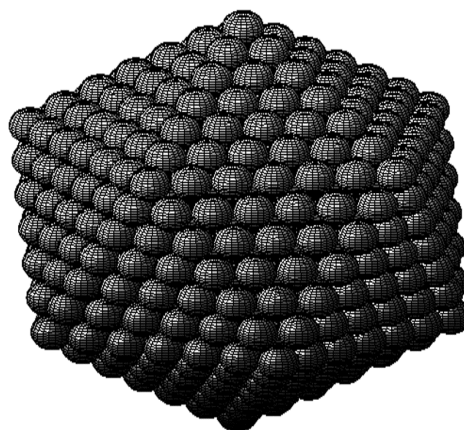


Рис. 9. Трёхмерная модель оптимального кластера Морса при  $N=923$

Точного доказательства глобальной оптимальности найденных решений нет в силу чрезвычайной сложности задачи глобальной оптимизации [3]. Однако результаты исследований с использованием

многочисленных эвристических алгоритмов ГО кластеров Морса, накопленные за прошедшие 20 лет и собранные в базах данных [19, 20], позволяют с уверенностью предполагать, что найдены оптимальные решения, во всяком случае в диапазоне размеров  $N=12-250$ . Для всех магических чисел, содержащихся в базе данных, кластеры при  $\rho=6$  имеют форму полного правильного икосаэдра. Этот факт и совпадение потенциальных энергий для кластеров  $N=55, 147$  и  $N=309, 561$  из работы [13] позволяют сделать предположение о глобальной оптимальности найденных конформаций.

В таблице приведены оптимальные конформации атомных кластеров Морса больших размеров.

Табл. Глобальные минимумы энергии атомных кластеров Морса больших размеров ( $\rho=6$ )

$N$	$v(X)$
55	-250,2866
116	-579,030
147	-760,631
178	-931,4886
258	-1399,628
309	-1710,202
485	-2761,9
561	-3235,560
817	-4802,61365
923	-5473,5
1415	-8560,523

Здесь полную икосаэдрическую структуру имеют кластеры  $N=55, 147, 309, 561, 923$  и  $1415$ . На два слоя меньше по отношению к кластерам  $N=147, 309, 561$  и  $923$  содержат кластеры  $N=116, 258, 485, 817$ . Эти кластеры имеют не до конца оформившуюся икосаэдрическую структуру (псевдоикосаэдрическую). Псевдоикосаэдрическую структуру имеет и кластер  $N=178$ , но в этом случае к полному икосаэдру, наоборот, добавляются два избыточных слоя. Глобальная оптимальность структур  $N=116, 147, 178$  подтверждается данными работы [19]. Из чего можно сделать предположение, что кластеры  $N=258, 485, 817$  также являются глобально-оптимальными.

### Заключение

В данной работе представлены результаты оптимизации атомных кластеров Морса больших размеров, созданных на базе геометрически обоснованного метода. Основу метода составляет алгоритм формирования конфигураций пятиугольников для размещения центров атомов, с помощью которых строятся пространственные слои плотной упаковки шаров.

Предложенный способ позволяет достаточно просто формировать начальные приближения икосаэдрических структур, оптимизация которых реализует глобально-оптимальные конформации атомных кластеров Морса для  $\rho=6$ .

В дальнейшем предполагается использовать икосаэдрические сетки для формирования начальных приближений атомных кластеров с неикосаэдрическими структурами.

### Благодарности

Работа выполнена при государственной поддержке Министерства образования и науки РФ, а также гранта РФФИ №16-41-630637.

### Литература

1. **Гусев, А.И.** Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А.И. Гусев – М.: Физматлит, 2007. – 416 с. – ISBN: 978-5-9221-0582-8.
2. **Столярчук, М.В.** Квантово-химическое моделирование молекулярных кластеров в программе ADF: Учебное пособие по выполнению лабораторного практикума / М.В. Столярчук, И.А. Дёмичев, А.И. Сидоров. – СПб: Университет ИТМО, 2015. – 43 с.
3. **Коварцев, А.Н.** К вопросу об эффективности параллельных алгоритмов глобальной оптимизации функций многих переменных / А.Н. Коварцев, Д.А. Попова-Коварцева // Компьютерная оптика. – 2011. – Т. 35, № 2. – С. 256-261.
4. **Heiles, S.** Global optimization of clusters using electronic structure methods / S. Heiles, R.L. Johnston // Quantum Chemistry. – 2013. – Vol. 113(18). – P. 2091-2109. – DOI: 10.1002/qua.24462.
5. **Doyle, J.P.K.** Structural consequences of the range of the interatomic potential: a menagerie of clusters / J.P.K. Doyle, D.J. Wales // Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions. – 1997. – Vol. 93. – P. 4233-4244. – DOI: 10.1039/A706221D.
6. **Ren, L.** Structural prediction of  $(Au_{20})_N$  ( $N=2-40$ ) clusters and their building-up principle / L. Ren, L. Cheng // Computational and Theoretical Chemistry. – 2012. – Vol. 984. – P. 142-147. – DOI: 10.1016/j.comptc.2012.01.024.
7. **Cheng, L.** Funnel hopping: searching the cluster potential energy surface over the funnels / L. Cheng, Y. Feng, Jie Yang, Jinlong Yang // The Journal of Chemical Physics. – 2009. – Vol. 130(21). – 214112. – DOI: 10.1063/1.3152121.
8. **Shao, N.** Probing the structural evolution of medium-sized gold clusters:  $Au_n^-$  ( $n=27-35$ ) / N. Shao, W. Huang, Y. Gao, L.M. Wang, X. Li, L.S. Wang, X.C. Zeng // Journal of the American Chemical Society. – 2010. – Vol. 132(18). – P. 6596-6605. – DOI: 10.1021/ja102145g.
9. **Lourenço, N.** DACCO: A discrete ant colony algorithm to cluster geometry optimization / N. Lourenço, F.B. Pereira // Proceedings of the 14th annual conference on Genetic and evolutionary computation (GECCO '12), Philadelphia, Pennsylvania, USA. – 2012. – P. 41-48. – DOI: 10.1145/2330163.2330170.
10. **Коварцев, А.Н.** Эволюционный детерминированный алгоритм глобальной оптимизации атомных кластеров Морса / А.Н. Коварцев // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 2. – С. 234-240. – DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-2-234-240.
11. **Посыпкин, М.А.** Методы и распределенная программная инфраструктура для численного решения задачи поиска молекулярных кластеров с минимальной энергией / М.А. Посыпкин // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2009): Труды международной научной конференции (Нижний Новгород, 30 марта – 3 апреля 2009 г.). – 2009. – С. 269-280.
12. **Oakley, M.T.** Symmetrisation schemes for global optimisation of atomic clusters / M.T. Oakley, R.L. Johnson, D.J. Wales // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2013. – Vol. 15. – P. 3965-3976. – DOI: 10.1039/C3CP44332A.
13. **Wu, X.** A dynamic lattice searching method with rotation operation for optimization of large clusters / X. Wu, W. Cai,

- X. Shao // Chemical Physics. – 2009. – Vol. 363(1-3). – P. 72-77. – DOI: 10.1016/j.chemphys.2009.08.001.
14. **Locatelli, M.** Global optimization: Theory, algorithms and applications / M. Locatelli, F. Schoen. – SIAM, 2013. – 445 p. – ISBN: 978-1-611972-66-5.
15. **Locatelli, M.** Local search based heuristics for global optimization: Atomic clusters and beyond / M. Locatelli, F. Schoen // European Journal of Operational Research. – 2012. – Vol. 222(1). – P. 1-9. – DOI: 10.1016/j.ejor.2012.04.010.
16. **Dugan, N.** Genetic algorithms in application to the geometry optimization of nanoparticles / N. Dugan, S. Erkoç // Algorithms. – 2009. – Vol. 2(1). – P. 410-428. – DOI: 10.3390/a2010410.
17. **Larsson, H.R.** Global optimization of parameters in the reactive force field ReaxFF for SiOH / H.R. Larsson, A.C.T. van Duin, B. Hartke // Journal of Computational Chemistry. – 2013. – Vol. 34(25). – P. 2178-2189. – DOI: 10.1002/jcc.23382.
18. **Hales, T.C.** A proof of the Kepler conjecture / T.C. Hales // Annals of Mathematics. – 2005. – Vol. 162(3). – P. 1065-1185. – DOI: 10.4007/annals.2005.162.1065.
19. Morse clusters: Table of global minima [Electronical Resource]. – URL: <http://staff.ustc.edu.cn/~clj/morse/table.html>. (Request date: 07.10.2016).
20. The Cambridge energy landscape database [Electronical Resource]. – URL: <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>. (Request data: 07.10.2016).
21. **Pullan, W.** Unbiased geometry optimisation of Morse atomic clusters / W. Pullan // Proceedings of IEEE World Congress on Computational Intelligence (WCCI 2010), 2010, Barcelona, Spain. – P. 4496-4502. – DOI: 10.1109/CEC.2010.5586213.
22. **Кондрашов, В.Е.** MATLAB как система программирования научно-технических расчётов / В.Е. Кондрашов, С.Б. Королёв. – М.: Мир, 2002. – 350 с. – ISBN: 5-03-003457-7.
23. **Берри, Р.С.** Конкуренция кубической гранцентрированной и икосаэдральной кластерных структур / Р.С. Берри, Б.М. Смирнов, А.Ю. Стрижев // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1997. – Т. 112, Вып. 3(9). – С. 1082-1090.

### Сведения об авторе

**Коварцев Александр Николаевич**, 1952 года рождения. В 1975 году окончил Куйбышевский авиационный институт (ныне – Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева) по специальности «Прикладная математика». Доктор технических наук (2000 год), профессор, работает заведующим кафедрой программных систем Самарского университета. Директор школы информатики Самарского Университета. А.Н. Коварцев – специалист в области автоматизации проектирования, разработки и тестирования сложных программных средств; надежности программного обеспечения; моделирования параллельных вычислений и глобальной оптимизации. Имеет более 90 научных публикаций. E-mail: [kovr\\_ssau@mail.ru](mailto:kovr_ssau@mail.ru).

ГРПТИ: 28.19.19

Поступила в редакцию 10 октября 2016 г. Окончательный вариант – 17 января 2017 г.

## GEOMETRIC METHOD FOR LARGE MORSE CLUSTERS FORMATION

A.N. Kovartsev<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Samara National Research University, Samara, Russia

### Abstract

This paper describes a geometrically founded method for constructing the initial configuration of a complete icosahedral structure of an atomic cluster. The method finds a global minimum of the cluster energy as a result of a single local optimization procedure. The method is based on the proposed algorithm for the stratified accommodation of atom centers, that allows one to form structural configurations commonly found among the clusters with global minimum of interatomic interaction energy. This algorithm provides the ability to build a spatial configuration of the dense packing of spheres for the formation of icosahedral and decahedral structures, as well as building complete icosahedrons with a large number of atoms. With the proposed method, we have reached the global minima for large Morse clusters (N=817, 923, and 1415), which is a record for Morse clusters with  $\rho = 6$ .

**Keywords:** atomic and molecular physics, numerical approximation, numerical analysis, global optimization, Morse clusters.

**Acknowledgements:** The work was partially funded by the Russian Federation Ministry of Education and Science and Russian Foundation of Basic Research grants #16-41-630637.

**Citation:** Kovartsev AN. Geometric method for large morse clusters formation. Computer Optics 2017; 41(1): 118-125. DOI: 10.18287/2412-6179-2017-41-1-118-125..

### References

- [1] Gusev AI. Nanomaterials, nanostructures, nanotechnology [In Russian]. Moscow: "Fizmatlit" Publisher, 2007. ISBN: 978-5-9221-0582-8.
- [2] Stolyarchuk MV, Demichev IA, Sidorov AI. Quantum-chemical modeling of molecular clusters in the program ADF: Schoolbook for the implementation of a laboratory practical work [In Russian]. Saint-Peterburg: "ITMO" Publisher; 2015.
- [3] Kovartsev AN, Popova-Kovartseva DA. On efficiently of parallel algorithms for global optimization of functions of several variables [In Russian]. Computer Optics 2011; 35(2): 256-261.

- [4] Heiles S, Johnston RL. Global optimization of clusters using electronic structure methods. *Quantum Chemistry* 2013; 113(18): 2091-2109. DOI: 10.1002/qua.24462.
- [5] Doye JPK, Wales DJ. Structural consequences of the range of the interatomic potential: a menagerie of clusters. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions* 1997; 93: 4233-4244. DOI: 10.1039/A706221D.
- [6] Ren L, Cheng L. Structural prediction of  $(Au_{20})_N$  ( $N=2-40$ ) clusters and their building-up principle. *Computational and Theoretical Chemistry* 2012; 984: 142-147. DOI: 10.1016/j.comptc.2012.01.024.
- [7] Cheng L, Feng Y, Yang J, Yang J. Funnel hopping: searching the cluster potential energy surface over the funnels. *J Chem Phys* 2009; 130(21): 214112. DOI: 10.1063/1.3152121.
- [8] Shao N, Huang W, Gao Y, Wang LM, Li X, L.S. Wang, Zeng XC. Probing the structural evolution of medium-sized gold clusters:  $Au_n^-$  ( $n=27-35$ ). *JACS* 2010; 132(18): 6596-6605. DOI: 10.1021/ja102145g.
- [9] Lourenço N, Pereira FB. DACCO: A discrete ant colony algorithm to cluster geometry optimization. *GECCO '12* 2012: 41-48. DOI: 10.1145/2330163.2330170.
- [10] Kovartsev AN. A deterministic evolutionary algorithm for the global optimization of morse cluster. *Computer Optics* 2011; 39(2): 234-240. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-2-234-240.
- [11] Posypkin MA. Numerical methods and the distributed software infrastructure for structural cluster optimizations [In Russian]. *Proc PaVT'2009* 2009: 269-280.
- [12] Oakley MT, Johnson RL, Wales DJ. Symmetrisation schemes for global optimisation of atomic clusters. *PCCP* 2013; 15: 3965-3976. DOI: 10.1039/C3CP44332A.
- [13] Wu X, Cai W, Shao X. A dynamic lattice searching method with rotation operation for optimization of large clusters. *Chem Phys* 2009; 363(1-3): 72-77. DOI: 10.1016/j.chemphys.2009.08.001.
- [14] Locatelli M, Schoen F. *Global optimization: Theory, algorithms and applications*. SIAM; 2013. ISBN: 978-1-611972-66-5.
- [15] Locatelli M, Schoen F. Local search based heuristics for global optimization: Atomic clusters and beyond. *European Journal of Operational Research* 2012; 222(1): 1-9. DOI: 10.1016/j.ejor.2012.04.010.
- [16] Dugan N, Erkoç S. Genetic algorithms in application to the geometry optimization of nanoparticles. *Algorithms* 2009; 2(1): 410-428. DOI: 10.3390/a2010410.
- [17] Larsson HR, van Duin ACT, Hartke B. Global optimization of parameters in the reactive force field ReaxFF for SiOH. *J Comput Chem* 2013; 34(25): 2178-2189. DOI: 10.1002/jcc.23382.
- [18] Hales TC. A proof of the Kepler conjecture. *Annals of Mathematics* 2005; 162(3): 1065-1185. DOI: 10.4007/annals.2005.162.1065.
- [19] Morse clusters: Table of global minima. Source: <http://staff.ustc.edu.cn/~clj/morse/table.html>.
- [20] The Cambridge energy landscape database [Electronic resource]. Source: <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>.
- [21] Pullan W. Unbiased geometry optimisation of Morse atomic clusters. *Proc WCCI* 2010: 4496-4502. DOI: 10.1109/CEC.2010.5586213.
- [22] Kondrashov VE, Korolev SB. *MATLAB as a programming system of scientific and technical calculations* [In Russian]. Moscow: "Mir" Publisher; 2002. ISBN: 5-03-003457-7.
- [23] Berry RS, Smymov BM, Strizhev AYu. Competition between face-centered cubic and icosahedral cluster structures. *JETP* 1997; 85(3): 588-592. DOI: 10.1134/1.558342.

#### Authors' information

**Alexander Kovartsev** (b. 1952) graduated with honour (1975) from S.P. Korolyov Kuibyshev Aviation Institute (presently, S. P. Korolyov Samara National Research University), majoring in Applied Mathematics. He received his Doctor of Engineering (2000) degrees from Samara State Aerospace University. Professor, chair of SA's sub-department software systems SU. Director of the School of Computer SU. His current research interests include computer-aided design, development and testing of complex software; simulation of parallel computing and global optimization. He has more than 90 scientific publications. E-mail: [kovr\\_ssau@mail.ru](mailto:kovr_ssau@mail.ru).

*Received October 10, 2016. The final version – January 17, 2017.*