

# Применение эвристических алгоритмов для структурной оптимизации биметаллических наночастиц

Мясниченко Владимир Сергеевич

Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН (Новосибирск)  
e-mail: viplabs@yandex.ru

Сегодня для структурной оптимизации наноразмерных металлических структур используются различные методы, применяемые к задачам глобальной оптимизации, такие как: алгоритм имитации отжига, поиск с запретами, случайный спуск (basin-hopping) и генетические алгоритмы [1].

Для заданной функции потенциальной энергии (потенциала межчастичного взаимодействия Клери-Розато [2]) и размера кластера, мы хотим найти то расположение атомов, которое соответствует самой низкой потенциальной энергии, которая является глобальным минимумом на гиперповерхности потенциальной энергии. Число минимумов экспоненциально повышается с увеличивающимся размером группы, особенно для наносплавов, где нужно рассматривать наряду с геометрическими изомерами также все возможные перестановочные изомеры (*homotops*). В последние годы *генетические алгоритмы* (ГА) широко применяются для оптимизации модельных биметаллических наночастиц различных размеров [3-4]. Рассматривается популяция решений, каждое из которых соответствует определенной конфигурации биметаллического кластера. Во время эволюции к решениям применяются операторы скрещивания, мутации и отбора. На этапе отбора выбираются те конфигурации, которые имеют максимальное значение функции пригодности, т.е. соответствуют минимумам потенциальной энергии. Генетические и basin-hopping алгоритмы имеют сопоставимую эффективность [4], и оба метода превосходят процедуру имитации отжига, в качестве которой можно рассматривать молекулярную динамику наносистемы при плавном охлаждении из расплава.

Моделирование формы и структуры, включая ГА оптимизацию, бинарных нанокластеров золото-медь различного размера и состава проведено с помощью программы [5].

1. Leary R.H. Global Optimization on Funneling Landscapes // Journal of Global Optimization. 2000. Т. 18. № 4. С. 367–383.

2. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. Т. 48. № 1. С. 22–33.

3. Ferrando R., Jellinek J., Johnston R.L. Nanoalloys: from theory to applications of alloy clusters and nanoparticles. // Chemical Reviews. 2008. Т. 108. № 3. С. 845–910.

4. Núñez S., Johnston R.L. Structures and Chemical Ordering of Small Cu–Ag Clusters // The Journal of Physical Chemistry C. 2010. Т. 114. № 31. С. 13255–13266.

5. Мясниченко В.С. Молекулярно-динамическое моделирование и био-инспирированная оптимизация бинарных и тройных металлических наноструктур. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011615692 от 20.07.2011г.