

УДК 004.021

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ФОРМИРОВАНИЯ НАЧАЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ КОНФОРМАЦИЙ АТОМОВ КЛАСТЕРОВ МОРСА НА ОСНОВЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИ ОБОСНОВАННОГО МЕТОДА

Климашова Г. П.

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С. П. Королёва

Цель работы: разработка алгоритма формирования начальных приближений конформаций атомов кластеров Морса на основе геометрически обоснованного метода

Согласно последней точке зрения, кластер – это система, состоящая из конечного множества одинаковых частиц (атомов, молекул, ионов), обычно связанных между собой. Кластеры стали восприниматься как единый физический объект, начиная с 80-х годов прошлого столетия, но и сегодня их часто используют в качестве модели макроскопических систем. Кластеры на сегодняшний день всё чаще обращают на себя внимание исследователей и учёных, так как в последнее время значительно вырос интерес к методам получения сверхмелкодисперсных кластерных структурных материалов (наночастиц) [1].

Изучение механизмов структурирования самих наночастиц связано с тем, что образование функциональных структур и нанокристаллических кластеров позволяет придавать материалам новые, очень неожиданные электрические, магнитные и оптические свойства [2]. Помимо этого, информация о структурном устройстве атомных кластеров имеет большое значение в различных областях человеческой деятельности, например, в медицине, катализе, при моделировании металлов (золото, никель, медь), изучении проблемы сворачивания белка, понимании процессов конденсации паров воды в облаках и т.д. [3].

При работе с кластерами основной задачей является обнаружение такой геометрической структуры, иными словами **конформации**, при которой кластер обладает минимальной потенциальной энергией. Конформация, при которой достигается энергетический минимум для конкретного кластера, называется оптимальной.

Работа посвящена «жестким» кластерам, которые из-за своей сложной структуры практически не изучены, в отличие от мягких. Элементы «мягкого» кластера вминаются друг в друга как пластилиновые шарики. Элементы «жесткого» кластера едва соприкасаются друг с другом. Чем меньше значение коэффициента жесткости, тем мягче кластер.

Одной из наиболее популярных моделей кластера является так называемый «кластер Морса». Эта модель позволяет описывать различные конфигурации металлических кластеров и находить среди них оптимальные, имеющие минимальную потенциальную энергию межатомных связей. Следует отметить, что поиск оптимальных конформаций кластеров Морса является трудной задачей, которая наилучшим образом подходит для разработки и исследования новых алгоритмов.

Поставленная задача, как и любая задача глобальной оптимизации, несёт в себе «проклятие размерности». На сегодняшний день не существует ни одного не экспоненциального алгоритма её решения. И несмотря на возможности, которые открывают кластеры, в России это направление развито слабо. Не существует даже российских баз данных с информацией о кластерах (зарубежные базы данных [4, 5]). Это только подтверждает, что поставленная передо мной задача является актуальной проблемой современной мировой науки, в особенности российской.

Для такой проблемы как большая размерность кластеров учёными было найдено несколько способов решения. Наибольшую популярность заслужили геометрически-обоснованные методы.

Для обеспечения удобной работы с кластерами была спроектирована и реализована специальная система. Важно, что алгоритмы для подсистемы работы с кластерами были разработаны кафедрой программных систем Самарского университета [3]. Для реализации системы был выбран мощный инструмент технических расчетов MATLAB, а для реализации справочной подсистемы – стандартные инструменты создания web-приложения: HTML, CSS, JavaScript. Таким образом, была получена система, которая является удобным инструментом для работы с кластерами и имеет возможность расширения. Так, мы можем добавлять новое понятие в словарь терминов, статью или перевод в банк статей, дополнять существующий функционал новыми модулями и так далее.

В ходе работы над кластерами Морса была получена таблица закономерностей роста кластеров, которая содержит информацию о 234 кластерах. В ходе анализа полученных таблиц были обнаружены:

- Эталонные слои кластеров.
- «Магические числа».
- Конформации, которыми обладают «жёсткие кластеры».
- Пути наращивания кластеров.

Результаты работы уже были представлены на нескольких конференциях, итогами которых являются опубликованные тезисы докладов: на 67 молодёжной научной конференции Самарского Университета и на Международной научно-технической конференции «Перспективные информационные технологии» 2017 (в номинации «автоматизированные системы научных исследований»).

Также работа была высоко оценена на региональном этапе и успешно прошла модерацию на федеральном уровне Всероссийского конкурса прорывных проектов «IT-прорыв» в номинации «IT в образовании».

Проект прошёл отбор на 5-ый юбилейный Молодежный форум «ИВолга 2017» в номинации «Инновации и техническое творчество».

Библиографический список

1. Смирнов Б. М. Кластеры и фазовые переходы// Успехи физических наук. 2014. №4. Т.177. С.369-373.
2. Gafner Y. The estimation of possibility of using order-disorder transition phenomena in Ni, Cu and Au nanoclusters for advancing the efficiency of information recording processes// J Nanosci Nanotechnol. 2014. № 14(7). P.5138-5144.
3. Коварцев А. Н. Эволюционный детерминированный алгоритм глобальной оптимизации атомных кластеров Морса// Компьютерная оптика. 2015. №2. Т. 39. С. 234-240.
4. Morse Clusters: Table of global minima [Электронный ресурс] // The Cambridge Cluster Database: [сайт]. URL: <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html> (дата обращения: 28.05.2017).
5. Morse Cluster: Table of global minima (7-240) [Электронный ресурс] // The Cambridge Cluster Database: [сайт]. URL: <http://staff.ustc.edu.cn/~clj/morse/table.html> (дата обращения: 23.05.2017).