论文

一种改进的动态格子算法在 Au 团簇基态结构预测中的应用

漆学志*, 许如初*, 汪光炼, 陈超

华中科技大学计算机科学与技术学院, 武汉 430074

*联系人, 漆学志, E-mail: qixuezhi712@qq.com; 许如初, E-mail: xrcy@hust.edu.cn

收稿日期: 2015-04-10; 接受日期: 2015-07-07; 网络出版日期: 2016-01-18

国家自然科学基金资助项目(批准号: 61370184, 61070235)

摘要 借助计算机强大的计算能力通过数学的方法预测团簇的最低能量结构, 是本文的主要思想和工作. 针对 Au 团簇的结构优化问题, 本文提出了一种改进的动态格子搜索算法. 将该算法用于 Gupta 势能建模的 Au 团簇对其进行优化求解, 在若干国际已知算例上, 找到了它们其中许多新的最低能量结构. 为了用 Gupta 势能描述 Au 团簇原子之间的相互作用, 本文采用了两组不同的参数. 利用参数一($A=0.11844$, $B=1$, $p=10.15$, $q=4.13$), 优化了原子数 $N=38-100$ 的 Au 团簇. 其中, 对于原子数 $N=38, 55$ 这两个算例, 本文算法的结果优于此前文献中的最好结果. 另外, 利用参数二($A=0.2061$, $B=1.79$, $p=10.229$, $q=4.036$), 优化了原子数 $N=100-200$ 的 Au 团簇, 其中对于原子数 $N=100, 110, 120, 130, 140, 150, 160, 170, 180, 190, 200$ 的 Au 团簇, 本文算法所达到的势能均优于此前文献中的最好结果. 结果表明了本文算法对于团簇结构优化问题求解的高效性.

关键词 全局优化, Gupta 势能, 动态格子搜索, 表面操作

PACS: 31.15.-p, 36.20.Kd, 36.40.-c, 36.40.Qv

1 引言

团簇是由几个至几千个原子通过物理或化学结合力形成的相对稳定的聚集体. 团簇的多数性质都与团簇内部的原子排列方式有关, 确定团簇的稳定几何结构是一项重要的基础性研究. 近年来, 对于 Au 团簇的几何结构, 有关学者进行了不少研究, 相关结果已有发表. 从理论上说, 在团簇各原子间相互作用势已知的情况下, 确定其最低能量的稳态结构

实质上是一个多变量函数求最小值的优化问题. 因此, 对团簇的最低能量稳定结构的研究必须进行两方面的工作. 首先, 确定一个可靠的势能函数, 以确切地描述 Au 团簇各原子之间的相互作用; 其次, 设计一种有效的算法能在有限时间内获得 Au 团簇的稳态结构, 求出 Au 团簇的最小能量值.

目前已发表的文献中, 已有大量有关优化团簇结构的算法. 其中, 具有代表性且有效的算法有: basin-hopping 算法^[1], simulate annealing(SA)^[2], hierar-

引用格式: 漆学志, 许如初, 汪光炼, 等. 一种改进的动态格子算法在 Au 团簇基态结构预测中的应用. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2016, 46: 033001
Qi X Z, Xu R C, Wang G L, et al. A modified dynamic lattice searching method to predict the lowest energy structure of clusters for the Au clusters (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2016, 46: 033001, doi: 10.1360/SSPMA2015-00150

chical greedy algorithm(HGA)^[3], genetic-symbiotic algorithm^[4], heuristic algorithm with surface and interior(HA-SIO)^[5], dynamic lattice searching algorithm (DLS)^[6], simple greedy method with energy-based perturbation and a small population(EP-SGM)^[7]及这些算法的变形.

此前对 Au 团簇的研究经常采用 Gupta 势能模型^[8]和 Sutton-Chen 势能模型^[9]. 本文采用 Gupta 势能模型描述 Au 团簇原子间的相互作用, 对于原子数为 38–200 的 Au 团簇, 用一种改进的动态格子搜索的算法求解出它们的最低能量和稳态结构.

2 理论和方法

2.1 势能模型

Gupta 势能函数表述如表达式(1)

$$E(N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[A \sum_{j=1, j \neq i}^N e^{-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right)} - \left[\sum_{j=1, j \neq i}^N e^{2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right)} \right]^{\frac{1}{2}} \right], \quad (1)$$

其中, 参数 A, p, q 取决于原子类型, r_0 表示原子间的平衡距离. 由于 r_0 不影响团簇势能值, 为了便于计算取 $r_0=1$. 2012 年, 吴夏等人^[10]为了分析 Au 团簇在 Gupta 势能与 Sutton-Chen 势能模型下的联系, 将 Gupta 势能函数稍作改动, 得到如下表达式(2):

$$E(N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[A \sum_{j=1, j \neq i}^N e^{-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right)} - B \left[\sum_{j=1, j \neq i}^N e^{2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right)} \right]^{\frac{1}{2}} \right]. \quad (2)$$

本文所采用的两组表征 Au 团簇的参数分别为参数一和参数二, 其中, 参数一 $A=0.11844, B=1, p=10.15, q=4.13$ ^[8]; 参数二 $A=0.2061, B=1.79, p=10.229, q=4.036$ ^[10].

2.2 算法描述

2.2.1 动态格子算法

动态格子算法起始于一个随机生成的团簇构型, 然后进行局部搜索优化, 迭代地执行下面 3 个步骤, 直到团簇能量不能降低为止^[11].

(1) 基于当前构型, 通过一系列对试探原子执行单个原子能量极小化的方法找出一些格子点, 这些格子点与能量较高原子所在的位置一起构成一个动

态格子.

(2) 将团簇中若干个能量高的原子随机地移动到动态格子位置上, 然后迭代地将能量最高的表面原子移到当前未被占据且能量最低的格点上, 直到团簇能量不再降低为止, 这样生成的解称为格子解.

(3) 用拟牛顿法(L-BFGS)对所得的格子解进行局部优化.

2.2.2 动态格子算法的缺陷

由于动态格子算法是动态地创建格子, 因此所创建的格子总是稍微偏离实际平衡位置, 这种偏离的程度对算法的性能有很大的影响. 当偏离程度较大时, 搜索将无法再继续优化团簇能量, 程序会很快结束^[12]. 换言之, 由于格子精度的原因, 动态格子搜索算法的性能在一些团簇上受到极大的限制.

2.2.3 改进后的算法

对于团簇结构优化问题的求解, 此前已经有人提出了动态格子算法^[6], 而且已经有人分别使用带内核的初始化策略^[13]、扰动策略^[14]、内部操作策略^[15]对动态格子算法进行过一些改进.

对于上述工作本课题组进行了深入研究, 在此基础之上对动态格子算法作了改进, 设计了新的动态格子算法, 此算法能计算出 Au 团簇的当前已知最佳结构.

算法框架:

(1) $S \leftarrow$ Initial Solution;

(2) $S1 \leftarrow$ Local Search(S);

(3) $S2 \leftarrow$ DLS($S1$);

(4) $S3 \leftarrow$ Surface Operator($S2$), 若团簇构型被改进, 回到步骤(3).

(i) 产生初始解 Initial Solution. 与文献[12]中的一样, 为了提高算法效率, 本文使用了规则的内核以构造团簇的初始构型. 对于 N 个原子的团簇, 首先生成一个比实际团簇尺寸更小包含 n 个原子($n \leq N$)的二十面体或十面体或八面体结构, 然后随机地产生另外的 $N-n$ 个原子位置, 形成初始构型.

(ii) 局部搜索 Local Search. 采用拟牛顿法(L-BFGS)进行局部搜索, 寻找团簇势能值达到极小值的结构. 研究表明, 对于团簇的结构优化, 拟牛顿法具有很强的局部搜索能力, 而且搜索速度快^[16].

(iii) 动态格子搜索 DLS. 原子在三维空间中的可能位置是连续型变量, 这使问题的搜索空间巨大

而漫无边际, 普通的穷举搜索也就变得不是现实可行的. 使用动态格子搜索算法, 将每一次的搜索空间固定到格子中, 使搜索空间大大减小, 且将这个连续型优化问题转变成一个离散型优化问题.

动态格子搜索过程就是迭代地执行格子构建以及格点搜索的优化过程.

动态格子构建过程: 对于当前已经获得的团簇结构, 增加一个原子, 通过单原子能量值极小化, 找出团簇表面一些稳定位置, 这些位置和团簇中能量值较高的 N_{mov} 个原子的位置都作为格点, 这些格点共同构成了一个格子.

格点搜索优化过程: 迭代地将能量最高的 N_{mov} 个原子移往当前未被占据且能量最低的格点位置上, 直到团簇能量值不能被降低为止. 这样所生成的每个解称为格子解, 将得到的若干格子解用拟牛顿法对每个格子解进行优化, 取能量最低的稳定构型为下一次格子构建的初始解.

(iv) 表面算子 Surface Operator. 研究表明, 由于动态格子的精度不够高, 动态格子搜索算法常会错过团簇的最优构型. 为了弥补动态格子搜索算法的这一缺陷, 本文整合了动态格子搜索算法和团簇表面算子获得了一种改进的动态格子搜索算法.

实际上, 表面优化算子可以表述为: 基于初始构型, 表面算子将团簇中若干最高能量的原子依次移往未被占据的最低能量的若干格点上, 直到团簇能量不能降低为止^[17].

实验结果也表明, 这样做能解决一部分动态格子搜索算法无法解决的问题. 例如, 在 $N=120, 150, 160, 170, 180$ 时, 动态格子搜索算法仅能求得的最低能量值分别为 $-425.705875, -534.136917, -570.670461, -606.819204, -643.741551$, 而加入表面优化算子之后, 它们都能被进一步优化, 得到其最低能量值分别为 $-425.723376, -534.224135, -570.888612, -607.196051, -644.041188$, 结果差异十分明显.

3 结果与讨论

3.1 本算法所得最低能量值

本文算法采用参数一对原子数 $N=38-100$ 的所有算例进行了多次测试计算, 其中 $N=38, 55, 75$ 的此前最低能量值为 Michaelian 等人^[8]在 1999 年使用遗传算法求得, 本文算法在 $N=38, 55$ 这两个算例上均得

到了比其结果更低的能量值, 在 $N=75$ 的算例上得到了与 Michaelian 等人相同的能量值, 结果如表 1 所示.

由表 1 的结果, 尽管在原子数 $N=38, 55$ 这两个算例上本文算法所得能量值更低, 但是表 1 中两种算法对于这两个算例所得构型并无明显差异, 也许本文算法对于它们没有找到新的更好的构型, 但是本文算法在 $N=38, 55, 75$ 这 3 个算例上的其他方面仍然表现出了其本身的优势.

本文算法分别采用随机的初始化策略、带不同内核的初始化策略, 对原子数 $N=38, 55, 75$ 这 3 个算例分别计算了 100 次, 其中能得到最终结果的次数如表 2 所示. 从表 2 可知采用合适的内核策略能提升算法的成功率, 但是提升的效果并不明显.

由于带内核的初始化策略只能略微提高算法成功率, 内核选用不合适有时成功率反而下降. 为了说明带内核初始化策略的实际效果, 本文对比了带内核与不带内核两种方式分别计算 100 次所需总时间, 统计结果如表 3 所示. 由表 3 的结果可知, 带不同内核的初始化策略都可以提高搜索的效率, 节省算法的整体运行时间.

同时, 对于原子数 $N=38, 55, 75$ 这 3 个算例, 本

表 1 使用参数一所得结果

Table 1 The results obtained of using the first set of parameters

N	此前已知的最低能量值	本算法所得能量值
38	-36.0187	-36.018738
55	-52.6569	-52.658889
75	-72.4872	-72.487200

表 2 使用不同初始化格局策略计算 100 次能成功的次数

Table 2 The successes numbers of using different initialization pattern strategies to calculate 100 times

原子数 N	随机产生 初始格局	以八面体 为内核	以十面体 为内核	以二十面体 为内核
38	29	30	33	44
55	25	26	16	20
75	3	5	4	4

表 3 使用不同初始化格局计算 100 次所需总时间(单位: s)

Table 3 The total time of using different initialization pattern to calculate 100 times (unit: s)

原子数 N	随机产生初 始格局	以八面体 为内核	以十面体 为内核	以二十面 体为内核
38	761	163	724	693
55	1880	1653	1822	1690
75	4502	3497	3566	3576

文还分别统计了计算 100 次所需的局部搜索次数, 其统计结果如表 4 所示. 由表 4 可知, 带不同内核的初始化策略都可以减少局部搜索次数.

除原子数 $N=38, 55, 75$ 的这 3 个算例以外, 对于原子数 $N=38-100$ 中的其余所有算例, 到目前为止没有公开发表的文献报道有关它们构型的结果. 这些结果表明了, 对于团簇结构优化问题求解, 与其他算法相比, 本文算法所具有的高效性.

本文采用参数二对原子数 $N=100-200$ 的所有算例进行了多次测试计算, 所得的部分结果如表 5 所示, 其中 $N=100, 110, 120, 130, 140, 150, 160, 170, 180, 190, 200$ 的此前最低能量值为吴夏等人^[10]在 2011 年使用动态格子算法求得, 本算法所得结果的最低能量值均比此前吴夏等人所得结果的更低. 其中对于原子数 $N=100, 120, 150, 160, 170, 180$ 的 Au 团簇能量值与文献中结果差异明显, 它们应该不是计算精度所致, 而是与文献中报道结果不同的新的更低能量构型. 这两种算法主要的区别就在于本文算法加入了表面优化算子, 这说明表面优化算子对于动态格子搜索算法是一种有益的补充, 在团簇结构优化问题上它能帮助算法搜索到更多不易搜索到的局部极值点, 保证获得的解的质量.

表 4 使用不同初始格局计算 100 次所需局部搜索次数

Table 4 The numbers of local search of using different initial pattern to calculate 100 times

原子数 N	随机产生 初始格局	以八面体 为内核	以十面体 为内核	以二十面体 为内核
38	1050	402	992	936
55	4066	3695	3990	3846
75	4730	4309	4152	4274

表 5 使用参数二所得结果

Table 5 The results obtained of using the second set of parameters

N	此前已知的最低能量值	本算法所得能量值
100	-353.107464	-353.126772
110	-389.415879	-389.415882
120	-425.705875	-425.723376
130	-462.202338	-462.202346
140	-498.419141	-498.419141
150	-534.136917	-534.224135
160	-570.670461	-570.888612
170	-606.819204	-607.196051
180	-643.741551	-644.041188
190	-680.483620	-680.483626
200	-717.297895	-717.297914

3.2 本文算法所得到的构型

采用参数一所得的原子数 $N=38, 55, 75$ 3 种 Au 团簇构型如图 1 所示, 这 3 个构型与高对称晶体结构相差较大, 这表明在原子数 $N=38, 55, 75$ 等幻数下, Au 团簇非对称晶体结构比高对称晶体结构更稳定, 而这一结论也被此前实验所证明^[18].

同时, 我们也注意到, 此前学者们利用 Gupta 势能求解 Ag 团簇的最低能量结构时, 其结果大多呈现出对称晶体结构. Au, Ag 这两种金属其化学性质相近, 但是它们的稳态结构却呈现出非对称晶体结构和高对称晶体结构两种不同的构型, 相去甚远. 究其原因, 仅从 Gupta 势能表达式的参数上分析, Au 团簇对应的 $A=0.11844, B=1, p=10.15, q=4.13$, 而 Ag 团簇对应的 $A=0.09944, B=1, p=10.12, q=3.37$, 其中 q 值相差较明显, 我们猜测, 这也许就是在同样的势能模型下这两种化学性质相近金属所得构型不同的原因. 但若究其根本原因, 恐怕还是应该从这两种金属原子之间的

图 1 (网络版彩图)本文利用参数一所得的部分构型. (a) Au38; (b) Au55; (c) Au75

Figure 1 (Color online) The partial configuration of using the first set of parameters obtained. (a) Au38; (b) Au55; (c) Au75.

化学结合力方面分析. 或许 Au 原子之间的结合力使得它们之间的化学键键长不一致, 这种键长长短不一使得 Au 团簇的最低能量结构呈现出一些非对称晶体构型.

本文利用参数二所得的部分构型如图 2 所示, 这些构型也表现出不对称性. Au 团簇的很多非对称构型让人难以理解, 但是, 也许恰恰就是这种非对称性才使 Au 成为最特殊的金属.

3.3 对参数一所得结果的分析

团簇能量的二阶差分可以很好地表示团簇的稳定性. 二阶差分的计算方法为

$$\Delta_2 E(N) = E(N+1) + E(N-1) - 2E(N). \quad (3)$$

为了对 Au 团簇的稳定性作进一步分析, 根据参数一所得结果计算出了原子数 $N=39-99$ 的 Au 团簇其能量的二阶差分, 所得结果如表 6 所示. 从表 6 中可以看出, 团簇能量的二阶差分值的绝对值都很小,

图 2 (网络版彩图)本文利用参数二所得的部分构型. (a) Au100; (b) Au110; (c) Au120; (d) Au130; (e) Au140; (f) Au150; (g) Au160; (h) Au170; (i) Au180; (j) Au190; (k) Au200

Figure 2 (Color online) The partial configuration of using the second set of parameters obtained. (a) Au100; (b) Au110; (c) Au120; (d) Au130; (e) Au140; (f) Au150; (g) Au160; (h) Au170; (i) Au180; (j) Au190; (k) Au200.

表 6 原子数 $N=38-100$ 的能量值及二阶差分Table 6 The energy value and the second-order differential value of atomic number $N=38-100$

N	Energy	$\Delta_2 E$	N	Energy	$\Delta_2 E$	N	Energy	$\Delta_2 E$
38	-36.018738	—	59	-56.578164	-0.028098	80	-77.398429	-0.010032
39	-36.986976	-0.009090	60	-57.571413	-0.023740	81	-78.392654	0.021909
40	-37.964304	0.005748	61	-58.588402	0.046371	82	-79.364970	0.001400
41	-38.935884	-0.008773	62	-59.559156	-0.005317	83	-80.335886	-0.004381
42	-39.916237	-0.01208	63	-60.535227	-0.046371	84	-81.311183	-0.032036
43	-40.908670	0.016843	64	-61.557669	0.048187	85	-82.318566	0.002086
44	-41.884260	0.005795	65	-62.531924	-0.019608	86	-83.323763	0.033487
45	-42.854055	-0.024589	66	-63.525787	0.022525	87	-84.295523	0.001089
46	-43.848439	0.024589	67	-64.497125	-0.021190	88	-85.266194	-0.039177
47	-44.818506	-0.021940	68	-65.489653	0.020012	89	-86.276042	0.016777
48	-45.810513	0.017628	69	-66.462169	-0.028986	90	-87.269113	0.008121
49	-46.784892	0.005667	70	-67.463671	-0.028718	91	-88.254063	0.018578
50	-47.753604	-0.009161	71	-68.493891	0.056568	92	-89.220435	-0.044815
51	-48.731477	-0.029072	72	-69.467543	-0.021068	93	-90.231622	0.028220
52	-49.738422	0.039103	73	-70.462263	0.004990	94	-91.214589	0.010415
53	-50.706264	-0.021437	74	-71.451993	-0.045477	95	-92.187141	-0.035924
54	-51.695543	0.025933	75	-72.487200	0.062165	96	-93.195617	0.017920
55	-52.658889	-0.029440	76	-73.460242	0.000287	97	-94.186173	-0.009434
56	-53.651675	0.001433	77	-74.432997	0.000979	98	-95.186163	0.005812
57	-54.643028	0.021368	78	-75.404773	-0.037687	99	-96.180341	0.000727
58	-55.613013	0.004834	79	-76.414236	0.025270	100	-97.173792	—

接近于 0. 这表明随着原子数量的增长, 团簇能量值也逐渐增长, 并且呈现出一种规律性, 即接近线性增长.

有研究表明, 由团簇的原子数与其能量的二阶差分之间对应关系所得到的曲线中, 团簇能量的二阶差分其波峰处所对应的团簇比波峰附近其他团簇的结构更稳定.

表 6 中 Au 团簇原子数与其能量的二阶差分之间的对应关系曲线如图 3 所示. 图中横轴表示团簇原子数、纵轴表示团簇的二阶差分. 从图 3 中可以直观地看到原子数为 46, 52, 54, 61, 64, 71, 75, 79, 86, 93 时, Au 团簇能量的二阶差分很明显地处于波峰, 这表明原子数为 46, 52, 54, 61, 64, 71, 75, 79, 86, 93 时, Au 团簇较为稳定.

图 3 (网络版彩图) $N=39-99$ Au 团簇能量所对应的二阶差分与原子数 N 的关系Figure 3 (Color online) The corresponding relationship between second-order differential value and the atomic number for Au clusters $N=39-99$.

4 结论

对于团簇结构优化问题求解, 基于拟牛顿局部搜索算法、动态格子算法、表面原子优化操作, 本文提出了一种新的优化算法. 采用参数一, 该算法对原子数 $N=38-100$ 范围内的 Au 团簇进行了优化求解. 特别地, 其中对于原子数 $N=38, 55$ 的 Au 团簇, 该算法的结果比此前已知的最好结果的能量更低.

同样地, 采用参数二, 本文算法对原子数 $N=100-200$ 范围内的 Au 团簇进行了优化求解. 特别地, 其中对于原子数 $N=100, 110, 120, 130, 140, 150, 160, 170, 180, 190, 200$ 的 Au 团簇, 该算法所得结果均优于文献中的最好结果.

实验结果表明, 本文提出的算法是一个对 Au 团簇结构优化问题有效的求解算法. 与此同时, 本文再次发现 Au 团簇拥有很多非对称稳态结构.

致谢 作者感谢赖向京博士提供了动态格子搜索算法的源代码.

参考文献

- Wales D J, Doye J P K. Global optimization by basin-hopping and the lowest energy structure of Lennard-Jones clusters containing up to 110 atoms. *J Phys Chem A*, 1997, 101: 5111–5116
- Wile L T. Simulated annealing and the topology of the potential energy surface of Lennard-Jones clusters. *Comput Mater Sci*, 2000, 17: 551–554
- Krivov S V. Hierarchical global optimization of quasiseparable systems: Application to Lennard-Jones clusters. *Phys Rev E*, 2002, 66: 025701
- Xiang Y H, Jiang H Y, Cai W S, et al. An efficient method based on lattice construction and the genetic algorithm for optimization of large Lennard-Jones clusters. *J Phys Chem A*, 2004, 108: 3586–3592
- Takeuchi H. Clever and efficient method for searching optimal geometries of Lennard-Jones clusters. *J Chem Inf Model*, 2006, 46: 2066–2077
- Shao X G, Cheng L J, Cai W S. A dynamic lattice searching method for fast optimization of Lennard-Jones clusters. *J Comput Chem*, 2004, 25: 1693–1698
- Cheng L J, Cai W S, Shao X G. An energy-based perturbation and a taboo strategy for improving the searching ability of stochastic structural optimization method. *Chem Phys Lett*, 2005, 404: 182–186
- Michealian K, Rendon N, Garzon I L. Structure and energetics of Ni, Ag, and Au nanoclusters. *Phys Rev B*, 1999, 60: 2000–2010
- Doye J P K, Wales D J. Global minima for transition metal clusters described by Sutton-Chen potentials. *New J Chem*, 1998, 22: 733–744
- Wu X, Chen S S, Sun Y, et al. Geometrical structures of gold clusters on Gupta and Sutton-Chen potentials. *Comput Theor Chem*, 2012, 1002: 43–48
- Cheng L J, Feng Y, Yang J. Funnel hopping: Searching the cluster potential energy surface over the funnels. *J Chem Phys*, 2009, 130: 214112
- Huang W Q, Lai X J, Xu R C. Structural optimization of silver clusters from Ag_{141} to Ag_{310} using a modified dynamic lattice searching method with constructed core. *Chem Phys Lett*, 2011, 507: 199–202
- Yang X L, Cai W S, Shao X G. A dynamic lattice searching method with constructed core for optimization of large Lennard-Jones cluster. *J Comput Chem*, 2007, 28: 1427–1433
- Shao X G, Yang X L, Cai W S. A dynamic lattice searching method with interior operation for unbiased optimization of large Lennard-Jones clusters. *J Comput Chem*, 2008, 29: 1772–1779
- Wu X, Cai W S, Shao X G. A dynamic lattice searching method with rotation operation for optimization of large clusters. *Chem Phys*, 2009, 363: 72–77
- Galen A, Gao J F. Scalable training of L1-Regularized Log-Linear models. In: *Proceedings of the 24th International Conference on Machine Learning*. Association for Computing Machinery, 2007, 9: 33–40
- Lai X J, Xu R C, Huang W Q. Geometry optimization of bimetallic clusters using an efficient heuristic method. *J Chem Phys*, 2011, 135: 1291–1293
- Garzon I L, Michaelian K, Beltran M R, et al. Lowest energy structures of gold nanoclusters. *Phys Rev Lett*, 1998, 81: 1600

A modified dynamic lattice searching method to predict the lowest energy structure of clusters for the Au clusters

QI XueZhi^{*}, XU RuChu^{*}, WANG GuangLian & CHEN Chao

School of Computer Science and Technology, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China

It is the main idea and work of this paper that mathematical methods are used to predict the lowest energy structure of clusters with powerful computing capability of the computer. A modified dynamic lattice searching method is proposed in this paper for Au clusters. It is applied to the Au clusters with Gupta potential, for a series of international examples of known, they are optimized by the algorithm, and many new lowest energies and structures are found. To describe the interactions between Au atoms in a cluster with Gupta potential, two sets of parameters are taken in this paper. With the first set of parameters ($A=0.11844$, $B=1$, $p=10.15$, $q=4.13$), the Au clusters with the number of atoms from 38 to 100 are optimized by us. The obtained results indicate that our results of $N=38, 55$ are better than the reference. On the other hand, with the second set of parameters ($A=0.2061$, $B=1.79$, $p=10.229$, $q=4.036$), the Au clusters with the number of atoms from 100 to 200 are optimized by us, and the results of $N=100, 110, 120, 130, 140, 150, 160, 170, 180, 190, 200$ are better than the reference. The experimental results show that the proposed method for predicting the lowest energy structure of clusters is efficient.

global optimization, Gupta potential, dynamic lattice searching, surface operator

PACS: 31.15.-p, 36.20.Kd, 36.40.-c, 36.40.Qv

doi: 10.1360/SSPMA2015-00150