

2021 年第十一届 MathorCup 高校数学建模挑战赛题目

B 题 三维团簇的能量预测

团簇，也称超细小簇，属纳米材料的尺度概念。团簇是由几个乃至上千个原子、分子或离子通过物理或化学结合力组成的相对稳定的微观或亚微观聚集体，其物理和化学性质随所含的原子数目而变化。

团簇是材料尺度纳米材料的一个概念。团簇的空间尺度是几埃至几百埃的范围，用无机分子来描述显得太小，用小块固体描述又显得太大，许多性质既不同于单个原子分子，又不同于固体和液体，也不能用两者性质的简单线性外延或内插得到。因此，人们把团簇看成是介于原子、分子与宏观固体物质之间的物质结构的新层次。团簇科学是凝聚态物理领域中非常重要的研究方向。

团簇可以分为金属团簇和非金属团簇，由于金属团簇具有良好的催化性能，因此备受关注。但由于团簇的势能面过于复杂，同时有时候还需要考虑相对论效应等，所以搜索团簇的全局最优结构（即能量最低）显得尤为困难。其中，传统的理论计算方法需要数值迭代求解薛定谔方程，并且随原子数增加，高精度的理论计算时间呈现指数增长，非常耗时。因此，目前需要对这种方法加以改进，例如：考虑全局优化算法，结合机器学习等方法，训练团簇结构和能量的关系，从而预测新型团簇的全局最优结构，有利于发现新型团簇材料的结构和性能。

请建立三维团簇能量预测的数学模型，并使用附件中的坐标和能量数据，解决下列问题。

备注：附件中数据集格式为 xyz ，第一行是原子数，第二行是能量，后面是原子的三维坐标。可用文本阅读器打开，并用 VMD 等软件进行可视化。

问题 1：针对金属团簇，附件给出了 1000 个金团簇 Au_{20} 的结构，请你们建立金团簇能量预测的数学模型，并预测金团簇 Au_{20} 的全局最优结构，描述形状；

问题 2：在问题 1 的基础上，请你们设计算法，产生金团簇不同结构的异构体，自动搜索和预测金团簇 Au_{32} 的全局最优结构，并描述其几何形状，分析稳定性；

问题 3：针对非金属团簇，附件给出了 3751 个硼团簇 B_{45}^- 的结构，请你们建立硼团簇能量预测的数学模型，并预测硼团簇 B_{45}^- 的全局最优结构，描述形状；

问题 4：在问题 3 的基础上，请你们设计算法，产生硼团簇不同结构的异构体，自动搜索和预测硼团簇 B_{40}^- 的全局最优结构，并描述其几何形状，分析稳定性。