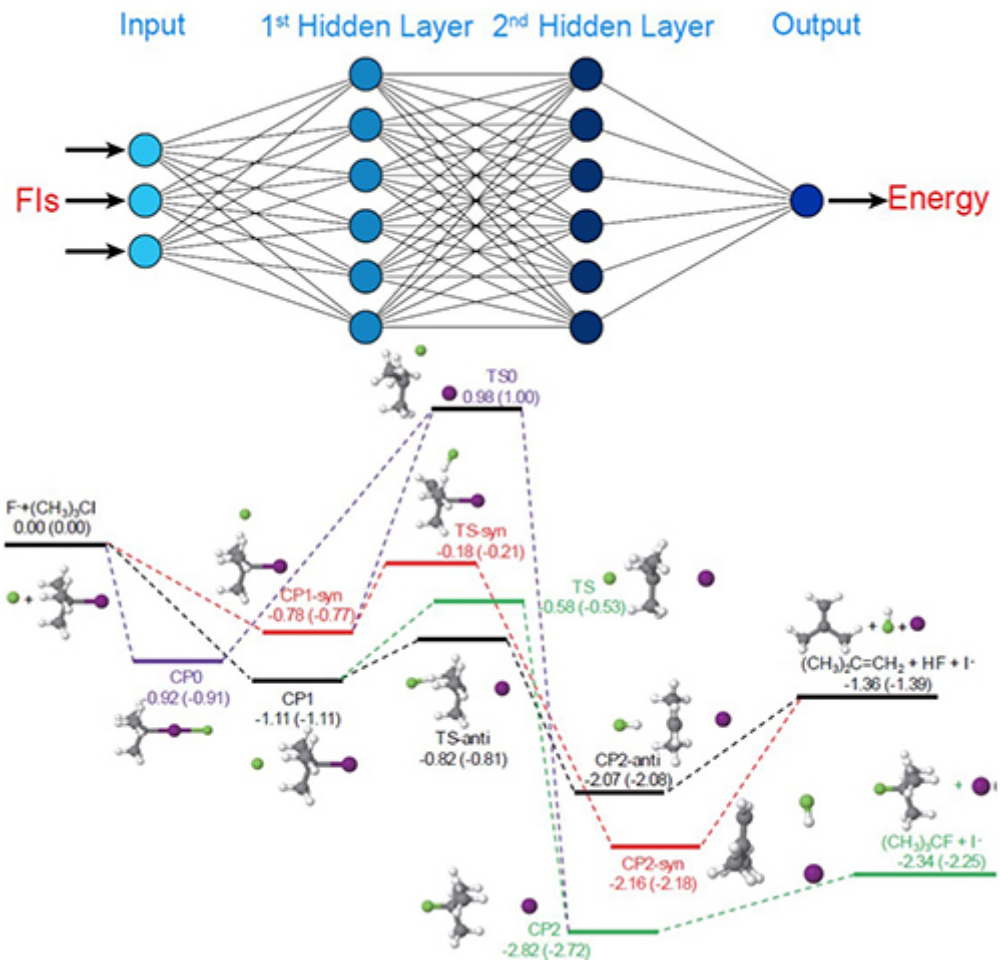
我所发表机器学习高精度化学反应势能面构建的综述文章

发布时间：2024-01-10 | 供稿部门：1113组

近日，我所化学动力学研究室反应动力学理论与计算研究组（1113组）傅碧娜研究员和张东辉院士受邀发表了机器学习高精度化学反应势能面构建的综述文章，系统介绍了团队近几年在基本不变量-神经网络（FI-NN）高精度势能面构建方法方面的发展和应用，探讨了该领域未来的机遇和挑战。

精确的全维势能面构建是反应动力学理论研究的先决条件和基础。随着体系规模的增大和自由度的急剧增加，如何精确而有效地构建复杂多原子反应的全维势能面成为动力学理论研究中的关键问题和难点。



傅碧娜和张东辉团队发展了高效精确的基本不变量-神经网络方法，实现了对包含几个原子到15个原子反应体系的高精度全维势能面构建。这些多通道反应涉及许多中间体、过渡态和产物，在燃烧、星际、有机、能源等化学领域具有重要意义。基于这些势能面的量子态分辨动力学模拟揭示了新奇的动力学机制，解释和预测了实验结果，为错综复杂的化学动力学提供了深刻的见解。

本综述中，团队重点介绍了近年来在基本不变量-神经网络反应势能面构建方向取得的一系列进展，包括有机气相反应（*Nat. Commun.* (https://doi.org/10.1038/s41467-022-32191-6)，2022；*J. Phys. Chem. Lett.* (https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpclett.2c01323?ref=pdf)，2022）、燃烧化学反应（*Chem. Sci.* (https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2020/SC/C9SC05951B)，2020；*J. Phys. Chem. Lett.* (https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpclett.1c01045?ref=pdf)，2021；*J. Chem. Theory Comput.* (https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jctc.0c01336?ref=pdf)，2021），光化学反应（*Chem. Sci.* (https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2023/SC/D3SC03328G)，2023；*JACS Au* (https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacsau.3c00414?ref=pdf)，2023；*J. Phys. Chem. Lett.* (https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpclett.2c01892?ref=pdf)，2022；*J. Phys. Chem. Lett.* (https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpclett.0c02173?ref=pdf)，2020）以及分子-表面反应（*J.*

Phys. Chem. Lett. (https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpclett.3c02556?ref=pdf)，2023；*J. Chem. Phys.* (https://doi.org/10.1063/5.0153538)，2023；*J. Chem. Phys.* (https://doi.org/10.1063/5.0131503)，2022）等。

相关成果以“Accurate fundamental invariant-neural network representation of ab initio potential energy surfaces”为题，发表在《国家科学评论》（*National Science Review*）上。该工作得到了国家自然科学基金、国家自然科学基金委“动态化学前沿研究”基础科学中心项目、科技创新2030重大项目等项目的资助。（文/图 傅碧娜）

文章链接：https://doi.org/10.1093/nsr/nwad321 (https://doi.org/10.1093/nsr/nwad321)

(http://www.dicp.cas.cn/)

地址：辽宁省大连市沙河口区中山路457号 邮编：116023
电话：+86-411-84379163 / 9198 传真：+86-411-84691570
邮件：dicp@dicp.ac.cn (mailto:dicp@dicp.ac.cn)

官方微信 化学之美

(https://bszs.c
method=show

版权所有 © 中国科学院大连化学物理研究所 本站内容如涉及知识产权问题请联系我们 备案号：辽ICP备05000861号-1 (https://beian.miit.gov.cn/) 辽公网安备21020402000367号