

---

# 大连化物所提出神经网络构建非绝热势能面的新方法

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/11027.html>

**本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！**

近日，中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室研究员傅碧娜、中科院院士张东辉团队，在化学反应的非绝热势能面构建中取得进展，提出一种新的神经网络方法构建包含锥形交叉的非绝热势能面。

在物理化学过程中，玻恩-奥本海默近似只有在所研究的电子态与其他电子态能量均足够分离的情况下才有效。当电子态出现简并或近简并时，玻恩-奥本海默近似失效。非绝热过程的动力学模拟原则上可以在绝热表象中进行，但当体系的电子态发生简并，例如锥形交叉时，电子态间的耦合会非常强烈，难以在绝热表象下直接用数学函数描述。因此，在非绝热表象下需要通过构建非绝热势能面来处理。此时，体系电子态间的耦合包含在非绝热势能面中，不需要被直接描述，且可简化薛定谔方程。

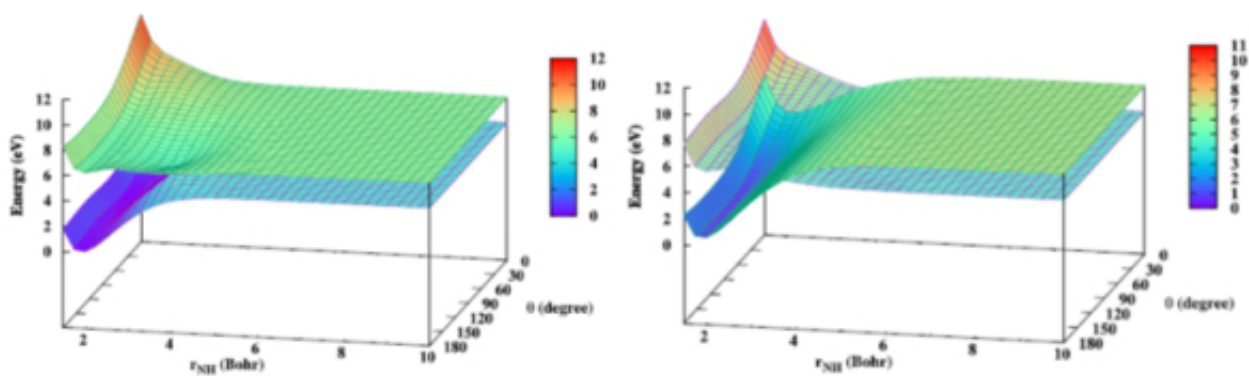
研究团队提出一种神经网络方法拟合构建具有锥形交叉的耦合势能面，从概念上简单清晰，在数值上仅依赖于神经网络函数，能被直观地实现和应用。不同于以前的拟合方法，研究人员通过拟合修正的导数耦合项，能够描述锥形交叉区域以及渐近区的导数耦合和能量，在全维全域上实现非绝热势能面矩阵的构建。此外，将其应用至

$\text{NH}_3$ 的光解体系，得到的动力学结果可以较好的重现实验结果。该方法可拓展到更复杂、多电子态的体系中，并对非绝热动力学的发展具有意义。

相关研究成果发表在《物理化学快报》（The Journal of Physical Chemistry Letters

）上。研究工作得到国家自然科学基金、国家科技部重点研发计划、中科院战略性先导科技专项（B类）“能源化学转化的本质与调控”的支持。

[论文链接](#)



大连化物所提出神经网络构建非绝热势能面的新方法

研究团队单位：大连化学物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发