
文章论述机器学习高精度化学反应势能面构建

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25716.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！

文章论述机器学习高精度化学反应势能面构建。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员傅碧娜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。相关成果发表在《国家科学评论》上。

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、燃烧化学反应以及分子-表面反应等。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1093/nsr/nwad321>

作者：张东辉等 来源：《国家科学评论》

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

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