**化学反应智能预测：方法和展望**

刘智攀

复旦大学化学系

### 高精度的适合化学反应的势能面长期以来必须依靠量子力学（第一性原理）计算，从而目前常常对复杂反应体系的计算模拟无能为力。为了摆脱此困境，进行超大规模（2000原子以上）材料和催化过程的原子模拟，近期我们发展了基于全局势能面的神经网络NN势函数，结合已有的Stochastic Surface Walking (SSW)全局优化算法，CBD 单端，DESW双端过渡态程序，形成了一个具备较完整功能的大规模原子模拟软件包，Large Scale Atomic Simulation Package (LSASP)。本报告着重介绍SSW-NN理论方法和框架, 目前SSW在表面催化，材料模拟中的应用,并预期基于SSW-NN的原子模拟能实现复杂反应的自动化预测。

部分相关应用

**1. Xie, Yao-Ping; Zhang, Xiao-Jie; Liu Zhi-Pan\* “Graphite to Diamond: Origin for Kinetics Selectivity”. J. Am. Chem. Soc.**2017, 139, 2545–2548

**2. Li, Ye-Fei\*; Zhu, Sheng-Cai; Liu, Zhi-Pan\* “Reaction Network of Layer-to-tunnel Transition of MnO2″，J. Am. Chem. Soc., 2016, 138, 5371**

**3. Zhu, Sheng-Cai; Xie, Song-Hai; Liu, Zhi-Pan\* “Nature of Rutile Nuclei in Anatase-to-Rutile Phase Transition”，J. Am. Chem. Soc., 2015, 137, 11532**

**4. Guan, Shu-Hui；Zhang, Xiao-Jie ; Liu, Zhi-Pan\* “Energy Landscape of Zirconia Phase Transitions”，J. Am. Chem. Soc., 2015, 137, 8010**