

Abstrakt

Neadiabatická molekulová dynamika je významným přístupem pro studium fotochemických jevů. Pomocí stochastického algoritmu a sady trajektorií je možné studovat jevy, při kterých selhává Bornova-Oppenheimerova aproximace. Tento přístup je však omezen velikostí molekul a délkou časových intervalů, které je možné studovat. Pomocným nástrojem mohou být techniky strojového učení, jež se osvědčily v mnoha různých oblastech. V této práci se zaměřuji na použitelnost techniky jádrové ridge regrese jako potenciálního nástroje pro akceleraci simulací neadiabatické molekulové dynamiky. Vinyl bromid je malá molekula s těžkým atomem bromu, což z výpočetního hlediska představuje vhodný testovací systém pro neadiabatickou molekulovou dynamiku se zahrnutím neadiabatických a spinorbitálních vazeb.