**Исследование локальной геометрии цеолита ZSM-5 с использованием CHGNet**

***Янжимаев Б.Ю., Велигжанин А.А.***

*Аспирант 2 года обучения*

*«Курчатовский институт», Москва, Россия*

*E-mail:* [*yanzhimaevborya@yandex.ru*](mailto:ivanov@yandex.ru)

В работе представлен подход к исследованию локальной геометрии цеолита ZSM-5 с использованием нейросетевых межатомных потенциалов CHGNet [1]. CHGNet — это современный метод машинного обучения, основанный на графовых нейронных сетях, который позволяет предсказывать энергии и силы в кристаллических структурах с высокой точностью. Благодаря учёту квантово-механических взаимодействий, CHGNet является эффективным инструментом для изучения сложных материалов, таких как цеолиты.

Для исследования локальной геометрии цеолита ZSM-5 был реализован алгоритм на Python с использованием библиотек CHGNet (Crystal Hamiltonian Graph Neural Network) [1] и ASE (Atomic Simulation Environment) [2]. В рамках работы проведена оптимизация геометрии для кластеров с различными радиусами (3, 4, 5 и 6 Å) вокруг центрального атома. Сравнены результаты оптимизации.

Результаты моделирования будут использованы для интерпретации экспериментальных данных, полученных методами XANES (ближняя тонкая структура рентгеновского спектра поглощения) и EXAFS (протяжённая (дальняя) тонкая структура спектров поглощения) на станции структурного материаловедения Курчатовского комплекса синхротронно-нейтронных исследований.

**Литература**

1. Chen C., Ong S.P. A universal graph deep learning interatomic potential for the periodic table // Nature Computational Science. 2022. Vol. 2. P. 718-728.

2. Larsen A.H. et al. The Atomic Simulation Environment—a Python library for working with atoms // J. Phys.: Condens. Matter. 2017. Vol. 29. P. 273002.