**Оценки энергии сжатых систем с использованием метода фермионных нейросетей**

***Кольченко М.М. 1, Бохан Д.А.1, Бедняков А.С.1***

*Студент, 6 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* [*maria.kolchenko@gmail.com*](mailto:maria.kolchenko@gmail.com)

При переходе от нормального состояния системы к сжатому меняются её свойства и структура, реакционная способность, стабильность, типы связей, которые она может образовывать, и взаимодействия, в которых принимает участие. Интерес к свойствам сжатых систем проявляют самые разные области науки, начиная от медицины и заканчивая астрофизикой. Активно исследуются системы в областях высокого давления, при экзотических внешних условиях, наложениях полей и внешних потенциалов.

Методы квантовохимического моделирования основаны на представлении многоэлектронной волновой функции как линейной комбинации более простых функций, основанных на конечном базисном наборе. Точное решение задачи требует использования больших базисных наборов, что сопровождается ростом ресурсных и временных затрат.

В последние годы возрос интерес к использованию нейронных сетей для решения широкого круга задач, в том числе для задач квантовой химии. В частности, при их представлении в качестве безбазисной модели волновой функции удалось получить хорошие результаты оптимизации энергии основного электронного состояния [1].

В работе предлагается модифицировать метод фермионных нейросетей для оценки энергий сжатых систем с различными вариантами действия внешних потенциалов - с жёсткой стенкой, ступенчатым и степенным потенциалами. Результаты расчёта проанализированы в сравнении методом CCSD(F12) [2]. Показано, что оптимизированный метод фермионных нейросетей FermiNet позволяет моделировать системы, находящиеся под действием внешних потенциалов, и, в случае полостей малых и средних размеров, даёт преимущество в точности над классическими высокоуровневыми методами.

Таблица 1. Результаты расчёта энергии основного состояния молекулы метана и стандартное отклонение выборки при различном числе точек выборки для внешнего потенциала

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| r0, Бор | 4096 точек в выборке | | 8192 точки в выборке | | E[2], Хартри |
| E, Хартри | σ | E, Хартри | σ |
| 2 | -35.237 | 0.003 | -35.237 | 0.003 | -35.233556 |
| 3 | -37.725 | 0.003 | -37.725 | 0.002 | -37.722328 |
| 4 | -38.783 | 0.003 | -38.783 | 0.003 | -38.78023 |
| 5 | -39.335 | 0.003 | -39.335 | 0.002 | -39.332323 |
| 6 | -39.660 | 0.003 | -39.660 | 0.002 | -39.657488 |
| 7 | -39.867 | 0.003 | -39.867 | 0.002 | -39.865142 |
| 8 | -40.008 | 0.003 | -40.008 | 0.002 | -40.005738 |
| 9 | -40.107 | 0.003 | -40.107 | 0.002 | -40.105265 |
| 10 | -40.180 | 0.003 | -40.180 | 0.002 | -40.178241 |
| 100 | -40.509 | 0.003 | -40.509 | 0.003 | -40.5074 |

**Литература**

1. Pfau, D. Ab initio solution of the many-electron schrödinger equation with deep neural networks // Phys. Rev. Research. 2020. Vol. 2. P. 033429

2. Pasteka L., Helgaker T. Atoms and molecules in soft confinement potentials // Mol. Phys*.* 2020. Vol. 118. P. e1730989.