

# Métodos “Deep learning” para el cálculo de funciones de onda vibracionales

**Florentino Borondo**

*Instituto de Ciencias Matemáticas (ICMAT)*

*Universidad Autónoma de Madrid*

En este seminario presentamos el diseño y utilización de dos modelos “Deep Learning” para generar las funciones de onda fundamental y excitadas de diferentes hamiltonianos adecuados para el estudio de las vibraciones de sistemas moleculares. Las redes neuronales generadas se entrenan con hamiltonianos que tienen soluciones analíticas y se pide posteriormente a la red que generalice las soluciones a funciones hamiltonianas más complejas. Este enfoque permite reproducir las funciones de onda vibracionales excitadas de diferentes potenciales moleculares. Todas las metodologías utilizadas se basan en datos, por lo que no asumen ninguna información sobre el modelo físico subyacente del sistema. Esto hace que esta aproximación sea versátil y pueda utilizarse en el estudio de diferentes sistemas en Química Cuántica.

**Data:** 12 de Marzo de 2021.

**Lugar:** Online a través de MS Teams. Tódalas persoas interesadas en asistir ao seminario poden solicitar, antes das 14 horas do 9 de marzo do 2021, o enlace de acceso a MS Teams ao correo-e: [masec@usc.es](mailto:masec@usc.es)

**Duración:** 1 hora (aproximadamente).

**Hora:** 12:00h.

