A U S H A N G

FREIE UNIVERSITÄT BERLIN

Fachbereich Mathematik und Informatik

Promotionsbüro, Arnimallee 14, 14195 Berlin

D I S P U T A T I O N

Dienstag, 5. Mai 2026, 13:00 Uhr

Ort: Seminarraum 010 & WebEx
(Fachbereich Mathematik und Informatik, Arnimallee 12, 14195 Berlin)

Disputation über die Doktorarbeit von

Péter Bernát Szabó

Thema der Dissertation:

Development of a practical deep-learning quantum Monte Carlo method

Thema der Disputation:

Advantages of a practical deep-learning quantum Monte Carlo method

Die Arbeit wurde unter der Betreuung von **Prof. Dr. F. Noé** durchgeführt.

Abstract: This lecture focuses on a deep-learning-based variational quantum Monte Carlo (VMC) approach to molecular electronic structure. In contrast to conventional second-quantized quantum chemical methods, which rely on Gaussian basis sets and large determinant expansions, deep-learning VMC approach operates directly in real space with flexible many-body wave functions parameterized by neural networks. This eliminates basis set errors, and provides an intuitive, variationally controlled framework with direct access to a compact wave function representation. Building on this core idea, I highlight how deep-learning VMC enables straightforward and unified treatments of different electronic states, nuclear geometries, and even chemical species, offering a conceptually simple yet powerful alternative for accurately describing strongly correlated electronic systems.

Die Disputation besteht aus dem o. g. Vortrag, danach der Vorstellung der Dissertation einschließlich jeweils anschließenden Aussprachen.

Interessierte werden hiermit herzlich eingeladen

Der Vorsitzende der Promotionskommission
Prof. Dr. F. Noé