

Esercizi:

1. Studio dell'energia di stato fondamentale di  $\text{OH}^\cdot$  e  $\text{OH}^-$  con metodi di chimica quantistica: HF, MP2, CCSD, CCSD(T), CASCI, CASSCF (FCI quando possibile) [agosto]
2. Ripetizione dell'esercizio 1 utilizzando gli IAOs [agosto]
3. Studio dell'energia di stato fondamentale di  $\text{OH}^\cdot$  e  $\text{OH}^-$  con algoritmi quantistici di tipo VQE [agosto]
4. -----
5. Scrivere le equazioni per il trattamento perturbativo delle eccitazioni elettroniche fuori dallo spazio di valenza
6. Analisi del caso di 2 elettroni in N orbitali
7. Implementazione del caso di 2 elettroni in N orbitali – obiettivo: codice pulito e performante (Davidson)
8. Implementazione del caso generale di M elettroni in N orbitali
9. Studio dell'energia di stato fondamentale di  $\text{OH}^\cdot$  e  $\text{OH}^-$  con VQE/IAO (i.e. VQE nello spazio di valenza) e trattamento perturbativo delle eccitazioni elettroniche fuori dallo spazio di valenza

Spiegazione degli acronimi:

- idrossile: OH
- IAO: intrinsic atomic orbitals (una base di pochi orbitali di valenza, estratta da una base molto piu' grande)
- VQE: variational quantum eigensolver
- Davidson: diagonalizzazione di un'Hamiltoniano  $H$  basata su una subroutine  $v \mapsto Hv$
- HF: Hartree-Fock
- FCI: full configuration interaction: diagonalizzazione esatta
- MP2: Moller-Plesset perturbation theory: scrivi  $H = H_{HF} + (H - H_{HF})$ , e teoria perturbativa al secondo ordine in  $H - H_{HF}$
- CCSD: coupled-cluster with singles and doubles  $\exp(T)|\Phi_{HF}\rangle$ ,  $T = \sum_{ai} t_i^a c_a^+ c_i + \sum_{abij} t_{ij}^{ab} c_a^+ c_b^+ c_j c_i$
- CCSD(T): coupled-cluster with singles and doubles and perturbative triples
- CASCI: complete active space configuration interaction, ossia diagonalizzazione esatta selezionando un insieme di orbitali
- CASSCF: complete active space self consistent field, ossia diagonalizzazione esatta ottimizzando un insieme di orbitali