

altri metodi di correlazione

Fulvio Ciriaco

11 novembre 2025



coupled cluster

$$H\Psi = E\Psi$$

$$\Psi = e^T \Phi$$

che vuol dire e^T ?

$$e^T = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{T^k}{k!}$$

$$\frac{de^T}{dT} = e^T$$



espansione

$$T = T_1 + T_2 + T_3 + \dots$$

dove $T_n = \sum_{t_n} a_{t_n} t_n$ sono combinazioni lineari arbitrarie di operatori di eccitazione di ordine n .

$$He^T \Phi = Ee^T \Phi$$

$$\langle \Phi | e^{-T} H e^T | \Phi \rangle = \langle \Phi | e^{-T} E e^T | \Phi \rangle = E \langle \Phi | \Phi \rangle$$

abbiamo un'equazione variazionale nelle incognite a_{t_n} .



1. CCSD
2. CCSD(T)
3. CCSDT
4. CCSD(TQ)

uff...



accesso agli stati eccitati, correlazione dinamica

1. MRCC, EOMCC
2. MRMPi, MRPT, MBPT

