

Název práce: Kvantově chemické algoritmy pro kvantové počítače

Autor: Jakub Višňák

Abstrakt: Práce se zabývá simulací kvantového výpočtu diagonalizace maticové reprezentace hamiltoniánu na klasickém počítači pro dva různé rozvoje vlnové funkce v rámci limited CI (LCI) metody pro popis všech elektronů molekuly SbH v rámci Dirac-Coulombova hamiltoniánu pro dva energeticky nejnižší elektronové stavy $X 0^+$ a $A 1$ pomocí Iterative Phase Estimation Algorithm (IPEA). V simulacích je použita reprezentace evolučního operátoru $\exp(i \hat{H} \Delta t)$ pomocí „compact mapping“, v teoretické části je naznačeno jakým způsobem lze simulovat „direct mapping“. Je studován vliv různé metodiky volby vstupního odhadu vlastního vektoru pro metody IPEA A a IPEA B pro které jsou rovněž porovnány hodnoty pravěpodobnosti úspěchu p_m pro různé body disociačních křivek molekuly SbH. Je ukázáno, že pro použité LCI rozvoje a pro vstupní odhady vlastního vektoru vycházející z LCI rozvoje označovaného jako „CISD(2)“ lze obě varianty metody IPEA použít až do mezijaderné vzdálenosti¹ $R \approx 6 a_0$. Byla zkoumána závislost hodnoty p_m na překryvu vlastního vektoru se svým vstupním odhadem - $|\langle \psi_0 | \phi \rangle|^2$ v případě metody IPEA B a diskutována použitelnost obou variant metody IPEA v dalších možných výpočtech.

¹ a_0 značí v celé práci Bohrovův poloměr (viz seznam zkratk).