

等待量子模拟革命的到来

(中国科学院理化技术研究所 戴 闻 编译自 Gabriel Popkin. *Physics*, October 21, 2019)

量子计算机最令人期待的用途之一，是作为开发新药、催化剂和材料的工具。它可以精确地模拟“化学物质”和“材料”的量子结构以及行为。但是材料科学家和化学家们警告说，量子机器远未能与当今日益强大的经典模拟方法竞争。技术产生的短期影响目前正被过度炒作。专家认为，聪明的设计选择，最终会让量子机器与经典计算机协力，实现效益最大化。量子计算机使用量子位或量子比特，它可以存储值0、1或两者的叠加，例如，75%的1和25%的0。此外，量子比特之间可以是量子力学的相互纠缠。这些属性使量子计算机能够快速探索特定种类问题的解决方案。

1981年，Richard Feynman在麻省理工学院发表演讲时指出，理论上量子计算机可以精确地模拟分子或物质，而不仅仅是近似模拟。当时，这纯粹是一个思想实验。到了20世纪90年代，物理学家生产出了量子比特，并演示了量子逻辑门。这些量子逻辑门是计算机操作的砌块。量子比特的量子态很容易因与

环境的相互作用受到干扰——这是量子计算机制造者此后将一直面对的巨大挑战。今天，由数十个相互连接的量子比特组成的基本量子计算机，在退相干崩溃前可以成功处理100多次门操作。2016年，谷歌宣布，它已经模拟了氢分子，并利用一台由微型超导电路建造的量子计算机估算了其基态能量。该机计算氢分子基态能量，对于较高精度，需要56量子位。IBM在2017年对氢化锂等也做了同样的工作。今年早些时候，一家初创公司IONQ利用量子机器模拟了水，这是迄今为止被计算的最大分子，该机中捕获的离子充当量子比特。

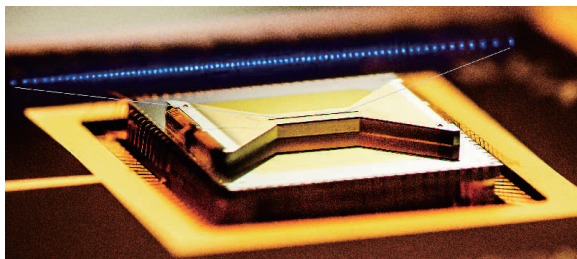
经典计算机模拟的王者地位，已有近八十年的历史，它可以追溯到二战时期的蒙特卡罗模拟核爆炸。1950年代，分子动力学技术的发展，把原子当作球，把化学键当作弹簧。1960年代，物理学家发展了密度泛函理论(DFT)，一种在分子或材料中研究电子相互作用的近似方法。今天化学家和材料科学家可以运行数百万原子的分子动力学

模拟。通过大型超级计算机，使用DFT，研究人员可以近似求解复杂分子的电子结构。例如Kristin Persson，她已经完成DFT模拟：利用镁离子而不是锂离子作为电荷载流子的可能性(在新型电池中用于阴极和电解质

材料)。她的团队在实验室中生产了被认为最有前途的候选材料，并证实新材料具有预期的特性。

量子计算有助于研究复杂电子结构材料(如超导体)，其中个别的电子—电子相互作用决定了材料的行为。研究人员可以开发出模拟此类“强关联”材料的量子算法，或将最终学会更多。药物通常是由50到80个原子组成的小分子。但是要想发挥作用，药物必须与蛋白质等生物分子相互作用。蛋白质可能包含数千个原子，远远超出了任何量子计算机在不久的将来所能处理的范围。但是，未来的噪声量子处理器不需要解决整个蛋白质的影响。人们可以使用DFT等经典方法，先行处理绝大多数系统，然后只在量子计算机上处理最量子的部分——例如，在蛋白质和配体之间键联所涉及的电子。

当前，一合理想的量子计算机有大约200个全操作量子比特。然而，量子比特的工作并不完美，因为可能需要数千个额外的量子位元来稳定这200个“逻辑”量子比特的量子态。谷歌生产的最大的基于逻辑门的量子计算机有72比特，它们脆弱的量子态在不到1毫秒的退相干时间内就崩溃了。展望量子计算机前景，它可能完成 workflow 的一部分。在工作流程中，经典计算机开设了特定问题，并将它送到量子计算机完成特定的计算，反之亦然。权威学者预言，在量子计算机开始解决有用的问题之前，预计将需要5到10年的预研。



IONQ 初创公司的科学家使用一个被捕获离子的线性阵列，计算了一个水分子的基态能量。上述图例包含了离子芯片之照片，并结合了离子的图像