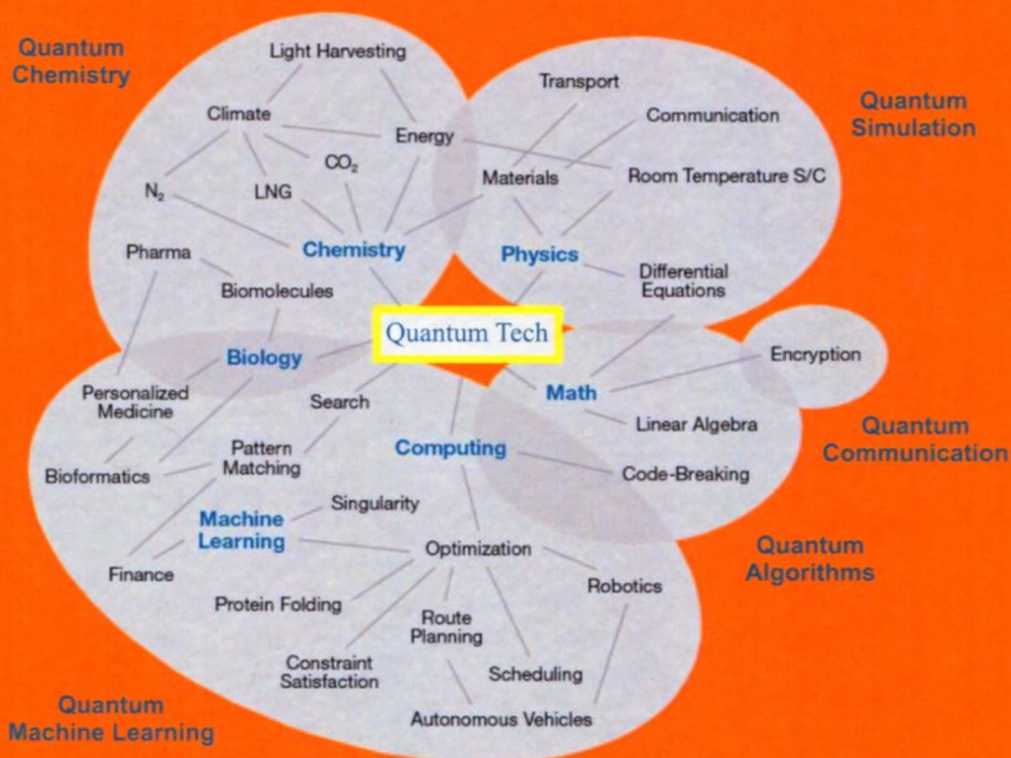


544.18
К84

Ю. А. Кругляк

Квантовое моделирование в квантовой химии на квантовых компьютерах



Одесса
ТЭС
2020

Ю. А. Кругляк

**Квантовое моделирование в квантовой химии
на квантовых компьютерах**

Одесса
ТЭС
2020

УДК 544.18:004.94

К 840

К 840 Кругляк, Юрий Алексеевич

**Квантовое моделирование в квантовой химии на квантовых компьютерах/
Ю. А. Кругляк. – Одесса: ТЭС, 2020 – 399 стр.; 27 рис.; табл. 4; 684 лит.**

Эра квантово-химических расчетов на квантовых компьютерах берет свое начало в 2005 году после публикации в *Nature* краткого сообщения о точном решении молекулярного уравнения Шредингера на квантовом компьютере для молекул LiH и H₂O при заданных базисах гауссовых функций, моделирующих атомные орбитали. Разработка квантовых алгоритмов для расчетов в квантовой химии идет стремительно и лавинообразно. Возникла потребность обобщить уже накопленные за 15 лет результаты, предпослав им необходимые сведения из квантовой информатики и квантовых вычислений. Книга может дать общее и вместе с тем достаточно полное представление о текущих достижениях в области квантовой химии на квантовых компьютерах.

Книга состоит из трех частей. Первая часть содержит обзор классической квантовой химии с ориентацией на три основных метода, наиболее часто используемых в расчетах на квантовых компьютерах – это методы полного конфигурационного взаимодействия, связанных кластеров и моделей в теории функционалов плотности.

Во второй части даются основы квантовой информатики, квантовых вычислений и той математики, которая существенна для разработки и реализации квантовых алгоритмов. Заканчивается эта часть рассмотрением квантового алгоритма вычисления фазы, который собственно и был использован в первой публикации 2005 года.

Третья часть – основная в книге. Она вместе с Приложением дает общий и вместе с тем цельный обзор современного состояния квантово-химических расчетов на квантовых компьютерах. Вначале обсуждаются классические приближенные методы, их ограничения и вызовы, предъявляемые классической квантовой химией при расчете статических и динамических свойств многоэлектронных систем. Далее конспективно обсуждается ситуация с вычислительной сложностью в квантово-химических расчетах. Основное содержание третьей части составляет обсуждение квантовых алгоритмов для помехоустойчивых квантовых компьютеров и для так называемых промежуточных шумящих квантовых устройств. В заключение, в качестве примера, довольно подробно излагается техника счета молекулы водорода на квантовом компьютере.

ISBN 978-617-7711-56-7

Содержание

Предисловие	
Список сокращений	5
Введение	15
Часть I. Винтажная квантовая химия	
Глава 1. Начала квантовой химии	
1.1. Введение	17
1.2. Приближение Борна - Оппенгеймера	18
1.3. Волновые функции	22
1.3.1. Спин-орбитали	22
1.3.2. Многоэлектронные спиновые состояния	25
1.3.3. Детерминанты Слэтера	26
1.3.4. Базисные функции	29
1.3.5. Матричные элементы гамильтониана	38
1.3.5.1. Матричные элементы одноэлектронного оператора	42
1.3.5.2. Матричные элементы двухэлектронного оператора	45
1.3.6. Метод Хартри - Фока	49
1.3.6.1. Теорема Бриллюэна	50
1.3.6.2. Неограниченные по спину уравнения Хартри - Фока	52
1.3.6.3. Теорема Купманса	56
1.3.6.4. Ограниченный метод Хартри - Фока	58
1.3.6.5. Метод Хартри - Фока - Рутана	62
1.3.6.5.1. Матрица плотности	64
1.3.6.5.2. Матрица Фока и энергия	66
1.3.7. Корреляция электронов	68
1.3.7.1. Метод конфигурационного взаимодействия	70
1.3.7.1.1. Теорема Несбета	72
1.3.7.1.2. О полном и усеченном КВ	74
1.3.7.2. Метод КВ в представлении вторичного квантования	76
2.3.7.2.1. Дырочный формализм	80
2.3.7.2.2. Разложение операторов физических величин по N -произведениям	83
2.3.7.2.3. Общий подход к вычислению матричных элементов	87
1.3.7.3. Многоконфигурационная теория ССП	92
1.3.7.4. Теория возмущений Меллера - Плессета	93
1.3.7.5. Методы связанных кластеров	98

1.3.7.6. Теория функционала плотности	106
1.3.7.6.1. Теоремы Кона - Хозэнберга	107
1.3.7.6.2. Уравнения Кона - Шэма	109
1.3.7.6.3. Приближение локальной плотности	111
1.3.7.6.4. Приближение обобщенного градиента	112
1.3.7.6.5. Ур-я Кона - Шэма в приближении ЛКАО	113
Литература	115
Часть II. Квантовые вычисления и квантовая информатика	
Глава 2. Квантовый мир	
2.1. Введение	121
2.2. Квантовая механика поляризованных фотонов	122
2.3. Одиночные кубиты	126
2.4. Измерение одиночных кубитов	130
2.5. Квантовый протокол передачи ключа	133
2.6. Пространство состояний одиночного кубита	136
2.6.1. Фазы относительные и глобальные	136
2.6.2. Геометрические образы состояний одиночных кубитов	138
Глава 3. Множественные кубитные системы	
3.1. Введение	141
3.2. Пространство квантовых состояний	142
3.2.1. Прямые суммы векторных пространств	142
3.2.2. Тензорные произведения векторных пространств	143
3.2.3. Пространство состояний n -кубитной системы	145
3.3. Перепутанные состояния	148
3.4. Предварительно об измерении n -кубитных систем	151
3.5. Квантовый протокол передачи ключа с использованием перепутанных состояний	154
Глава 4. Измерение состояний множественных кубитных систем	
4.1. Введение	157
4.2. Дираковские обозначения для линейных преобразований	157
4.3. Проекционные операторы для измерений	159
4.4. Формализм эрмитовских операторов для измерений	164
4.5. Постулаты измерений	166

Глава 5. Преобразование квантовых состояний	
5.1. Введение	171
5.2. Унитарные преобразования	172
5.2.1. Недопустимые преобразования: невозможность клонирования	174
5.3. Некоторые простые квантовые вентили	175
5.3.1. Преобразования Паули	177
5.3.2. Преобразование Адамара	178
5.3.3. CNOT и другие одиночно контролирующие двукубитные вентили	179
5.4. Применение простых вентилях	184
5.4.1. Плотное кодирование	185
5.4.2. Квантовая телепортация	186
5.5. Реализация унитарных преобразований в виде квантовых схем	188
5.5.1. Декомпозиция преобразований одиночных кубитов	189
5.5.2. Одиночно контролирующие преобразования одиночных кубитов	190
5.5.3. Множественно контролирующие преобразования одиночных кубитов	191
5.6. Стандартная модель квантовых схем	192
Глава 6. Квантовый алгоритм вычисления фазы	
6.1. Введение	193
6.2. Классическое преобразование Фурье	193
6.3. Квантовое преобразование Фурье	195
6.4. Квантовая схема для быстрого преобразования Фурье	195
6.5. Квазиклассический подход к квантовому преобразованию Фурье	198
6.6. Квантовый алгоритм вычисления фазы	199
Литература	202
Часть III. Квантовая химия на квантовых компьютерах	
Глава 7. Квантовая химия в начале эры квантовых компьютеров	
7.1. Введение и краткий исторический экскурс	205
7.2. Квантовая химия в эру квантовых вычислений	212
7.2.1. Начала и вызовы классической квантовой химии	212
7.2.2. Классические приближенные методы и их ограничения	213
7.2.2.1. Статические свойства: волновые функции и энергетические спектры	213

7.2.2.1.1. Теория связанных кластеров	213
7.2.2.1.2. Квантовый метод Монте-Карло	215
7.2.2.1.3. Метод точной диагонализации	215
7.2.2.1.4. Методы тензорных сетей	216
7.2.2.2. Динамические свойства: временная эволюция волновых функций	217
7.2.2.2.1. Молекулярная динамика	218
7.2.2.2.2. Квантовая временная эволюция	219
7.2.3. Квантовые компьютеры выводят за пределы классических ограничений	221
7.2.3.1. Статика: вычисление фазы и вариационные квантовые алгоритмы	223
7.2.3.2. Динамика: моделирование гамильтониана и гибридные методы	225
7.3. Вычислительная сложность	227
7.3.1. Классы сложности	227
7.3.2. Теория сложности в квантовой химии	231
7.3.3. Теория сложности в вибронике молекул	232
7.4. Алгоритмы квантового моделирования для помехоустойчивых квантовых компьютеров	235
7.4.1. Квантовые алгоритмы вычисления энергии	236
7.4.1.1. Моделирование гамильтонианов	237
7.4.1.2. Квантовый алгоритм вычисления фазы	239
7.4.1.3. Квантовое преобразование Фурье	241
7.4.2. Вычисление энергии основного состояния квантово-химических гамильтонианов	243
7.4.2.1. Подготовка состояний	243
7.4.2.2. Моделирование гамильтонианов в квантовой химии	245
7.4.2.3. Измерение свойств многоэлектронных систем	249
7.5. Квантовые алгоритмы для промежуточных шумящих квантовых устройств	250
7.5.1. Вариационные квантовые алгоритмы	252
7.5.1.1. Подготовка состояний	253
7.5.1.1.1. Унитарный метод связанных кластеров	254
7.5.1.1.2. Вариационная стратегия	256
7.5.1.1.3. Стратегия низко-глубинных схем	259
7.5.1.1.4. Аппаратно-эффективная стратегия	262

7.5.1.1.5. Альтернативные стратегии	263
7.5.1.2. Вычисление энергии	263
7.5.1.2.1. Усреднение гамильтониана	263
7.5.1.3. Методы оптимизации	264
7.5.1.4. Физическая реализация алгоритмов	266
7.5.1.5. Алгоритмы для возбужденных состояний	267
7.5.1.5.1. Свернутый спектр и лагранжевы методы	267
7.5.1.5.2. Линейный отклик:	
разложение квантового подпространства	268
7.5.1.5.3. Вариационный спектральный алгоритм	268
7.5.1.6. Вычисление свойств молекул	268
7.5.2. Другие гибридные квантово-классические алгоритмы в химии	269
7.5.2.1. Вариационный квантовый имитатор	269
7.5.2.2. Вариационный квантовый имитатор в мнимой области	270
7.5.2.3. Вариационный квантовый имитатор в мнимой области для возбужденных состояний	271
7.5.3. Не-вентильные методы в квантовой химии	271
7.5.3.1. Адиабатические методы	271
7.5.3.2. Линейная оптика	272
7.6. Перспективы	272
7.7. Дополнение	275
7.7.1. Отображение в кубиты	275
7.7.1.1. Отображение Джордана - Вигнера	275
7.7.1.2. Отображение Бравого - Китаева	276
7.8. Молекула водорода	276
7.9. Заключение	282
Литература	283
Приложение. Аннотированная библиография новейших исследований и квантово-химических расчетов на квантовых компьютерах	
Обзоры по квантовой химии на квантовых компьютерах R (5)	311
Обзоры общего характера RG (2)	314
Симметрия состояний S (9)	315
Возбужденные состояния ES (3)	319
Колебательные состояния VS (1)	321
Электронно-колебательные состояния EVS (1)	322
Производные от энергии ED (2)	322
Релятивистская квантовая химия RQC (2)	323

Алгоритм вычисления фазы PEA (3)	324
Вариационный квантовый алгоритм VQE (43)	326
Вычислительная сложность CC (1)	349
Полное конфигурационное взаимодействие FCI (5)	349
Метод связанных кластеров UCC (14)	352
Теория функционала плотности DFT (4)	359
Новые методы и алгоритмы NMA (38)	361
Квантовые вычислительные устройства QC (6)	380
Программирование квантовых компьютеров P (5)	382
Перспективные исследования PR (25)	385
Квантовые вычисления в целом QG (2)	398