一国际研究团队实现量子化学模拟

作者：周舟 来源：新华社

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/1287.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

一个多国研究人员组成的量子计算研究团队演示了世界上首个基于离子阱的量子化学模拟，提供了一种使用量子计算机研究分子化学键和化学反应的方法，这使量子计算机未来有望对基本化学过程进行精确建模。

发表在新一期美国《物理评论X》杂志上的这一研究显示，研究人员使用了4个被捕获的钙离子计算了氢分子和氢化锂的基态能量，即能量最少的量子态。

本次研究基于离子阱，离子阱是一种将离子通过电磁场限定在有限空间内的设备。

论文第一作者、澳大利亚悉尼大学的科尼柳斯·亨普尔说，目前最强大的经典计算机也难以对基本化学过程进行精确建模，而量子计算机有望成为理解物质、解决材料科学和医学等领域问题的新工具。

研究人员说，量子计算具体究竟能解决哪些问题目前尚不清晰，但量子化学有望成为量子计算技术得以运用的首个领域。量子化学是运用量子力学原理模拟计算复杂分子键和化学反应的科学，未来可帮助科学家设计新的催化剂，开发有机太阳能电池及设计个体化药品等。(来源：新华社 周舟)

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发