第一性原理核结构量子计算研究取得新进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/42323.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！

第一性原理核结构量子计算研究取得新进展。近日，中国科学院近代物理研究所科研团队在多费米子系统第一性原理核结构的量子计算研究中取得新进展。团队构建了一套普适性量子-经典混合计算框架，可用于计算核多体系统的格林函数和谱函数。相关成果以快报（Letter）形式发表于《物理评论C（Physical Review C）》。

第一性原理哈密顿量多体计算是揭示量子强关联体系规律的核心手段，广泛应用于量子化学、核物理等领域，但这类问题的希尔伯特空间随粒子数呈指数级增长，在经典计算机上面临难以逾越的计算资源限制。量子计算有望成为破解这一指数墙难题的颠覆性技术。现有的量子算法大多仅能求解基态等有限能级，无法获取体系完整束缚态谱与角动量等关键结构信息。此外，传统的编码方案线路编译开销高昂，严重制约了其在真实核结构问题中的应用。

近代物理所理论物理研究团队与合作者提出了一种适用于多费米子哈密顿量的新型量子编码方案。该方案规避了传统方法巨大的编译开销，且完整保留哈密顿量本身的内禀对称性，将所需量子门数量压缩至理论下界。

依托该编码方案，研究团队进一步构建了可求解原子核多体系统格林函数与谱函数的量子-经典混合计算框架。团队基于谱函数求解方案设计了双层扫描策略，能够完整求解全部束缚态能谱，包含各束缚态能量与对应角动量，规避了变分类量子算法面临的参数优化困难。

作为验证性计算，研究人员基于真实核相互作用哈密顿量，使用该量子算法计算得到了氧-20核素全束缚态能谱及对应总角动量量子数。基于经典模拟器开展的量子模拟结果与经典全组态相互作用计算结果符合良好，同时和实验结果有较好一致性。该框架兼具普适性与可扩展性，为原子核结构第一性原理的量子计算提供了新路径，可直接推广至多领域强关联多体问题研究。（来源：中国科学报 叶满山）

相关论文信息：https://doi.org/10.1103/1spg-5ld3

作者：James P Vary 来源：《物理评论C》

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