量子化学的类比模拟研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/7671.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！

基于量子化学的计算机模拟广泛地应用于现代化学反应过程的研究中。但是随着分子中原子数的增加，体系自由度的数目急剧地增长，这已经超越了经典超级计算机的计算能力。为了研究复杂分子的反应过程，可以利用量子模拟的方法，即通过精确控制和调节冷原子系统来模拟化学反应。

最近在中国科学院理论物理研究所副研究员石弢参加的一项研究工作(*Nature* 574, 215(2019))中，通过设计光晶格中的冷原子实现了量子化学的类比模拟。在化学反应过程中，分子的性质由它的外层电子结构决定，而电子之间存在着库仑相互作用。因此，量子化学类比模拟的一个至关重要的问题是如何实现中性原子间的库仑相互作用。我们知道，在电子系统中，两个电子通过传递一个虚光子产生库仑力。基于类似的机制，可以设计方案实现中性费米原子间的库仑相互作用。在这个方案中，利用在玻色原子背景中运动的费米原子模拟分子中的电子，同时通过外加激光场引起背景玻色原子从基态到激发态的跃迁。这些处于激发态的媒介玻色原子可以像光子一样在光晶格中自由传播，从而诱导费米原子间的相互作用。通过对激光场的频率和强度、原子碰撞的散射长度、以及原子色散关系的有效设计，可以实现费米原子间的库仑相互作用。

这个方案不仅可以用来模拟小分子，例如氢分子和氦分子，而且可以用于由多个原子形成的复杂分子间化学反应的量子模拟。通过对比在小分子系统中经典超级计算机的计算结果，可以验证这个量子化学模拟方案的有效性。在未来的工作中，通过对复杂分子化学反应的量子模拟，可以探索一些在现代经典超级计算机中难以研究的各种化学反应过程。

论文链接

氢分子模拟

研究团队单位：理论物理研究所

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