

УДК 544.18  
ББК 24.511.4  
Ш26

**Шарки К. Л., Чанс А.**

Ш26 Квантовая химия и квантовые вычисления с примерами на Python / пер. с англ. к.ф.-м.н. П. В. Михеева. – М.: ДМК Пресс, 2023. – 282 с.: ил.

**ISBN 978-5-93700-162-7**

Книга на основе постулатов квантовой механики объясняет сложную связь квантовой химии и квантовых вычислений. Показано, как можно использовать для этого Python и программные пакеты химических расчетов с открытым исходным кодом, такие как Qiskit. На примерах расчетов реальных атомов и молекул показано, как квантовая химия и квантовые вычисления помогают решать задачи химической науки и промышленности.

Издание предназначено для тех, кто интересуется химией и информатикой, а также для специалистов, стремящихся к углублению знаний в области квантовой вычислительной химии.

УДК 544.18  
ББК 24.511.4

Copyright © Packt Publishing 2022. First published in the English language under the title “Quantum Chemistry and Computing for the Curious” – (9781803243900).

Все права защищены. Любая часть этой книги не может быть воспроизведена в какой бы то ни было форме и какими бы то ни было средствами без письменного разрешения владельцев авторских прав.

ISBN 978-1-80324-390-0 (англ.)  
ISBN 978-5-93700-162-7 (рус.)

© 2022 Packt Publishing  
© Перевод, оформление, издание,  
ДМК Пресс, 2023

# Содержание

<b>От издательства</b> .....	12
<b>Предисловие</b> .....	13
<b>Об авторах</b> .....	15
<b>Благодарности</b> .....	16
<b>О рецензенте</b> .....	17
<b>Введение</b> .....	18
<b>Глава 1. Введение в квантовые концепции</b> .....	24
Технические требования.....	25
1.1. Обзор истории квантовой химии и механики.....	26
1.2. Частицы и вещество.....	29
Элементарные частицы.....	30
Составные частицы.....	30
Атомные ядра.....	30
Атомы.....	31
Молекулы.....	32
1.3. Квантовые числа и квантование вещества.....	32
Электроны в атоме.....	32
Волновая функция и РЕР (принцип исключения Паули).....	33
Фермионы.....	33
Бозоны.....	34
Композитные частицы.....	34
Обозначение Дирака.....	34
1.4. Свет и энергия.....	34
Постоянная Планка и планковское соотношение.....	34
Длина волны де Бройля.....	35
Принцип неопределенности Гейзенберга.....	35

Энергетические уровни атомов и молекул.....	35
Водородный спектр .....	35
Постоянная Ридберга и его формула .....	36
Конфигурация электронов .....	37
Расчет электронной конфигурации атомных элементов с использованием правила Маделунга.....	37
Уравнение Шрёдингера.....	39
Графики плотности вероятности волновых функций электрона в атоме водорода.....	40
1.5. Краткая история квантовых вычислений .....	40
1.6. Объяснение теории сложности .....	42
Выводы к главе .....	43
Вопросы .....	44
Ответы .....	44
Ссылки к главе .....	45

## Глава 2. Постулаты квантовой механики .....49

Технические требования.....	50
2.1. Постулат 1. Волновые функции.....	51
2.1.1. Сферические гармонические функции.....	53
Импорт модулей NumPy, SciPy и Matplotlib Python .....	55
Настройка сетки полярных (тета – $\theta$ ) и азимутальных (фи – $\varphi$ ) углов.....	55
Раскраска нарисованной поверхности вещественных функций сферической гармонической функции (Y) .....	56
Определение функции, отображающей набор осей x, y, z и задающей заголовок фигуры.....	56
Определение функции, которая вычисляет действительную форму сферической гармонической функции (Y) .....	57
Определение функции, отображающей функции пространственных волн для диапазона значений квантового числа углового момента и магнитного квантового числа .....	57
Пространственные волновые функции атома водорода.....	58
Вопросы для рассмотрения.....	58
2.1.2. Учет моментов с использованием коэффициентов Клебша–Гордана (CG).....	58
Использование коэффициентов CG с Python SymPy.....	59
Импорт модуля коэффициентов SymPy CG.....	59
Определение коэффициента CG и оценка их значений.....	59
Пространственные волновые функции различных состояний атома азота с тремя р-электронами.....	63
Пространственно-волновая функция основного состояния атома азота с тремя р-электронами в $L = 0, M = 0$ .....	64
Настройка словаря из шести конфигурационных кортежей .....	64
Определение функции, которая вычисляет произведение коэффициентов CG.....	65
Вычисление и печать коэффициентов CG.....	65
Определение набора пространственных волновых функций .....	66

Вычисление волновой функции атома азота тремя р-электронами ( $L = 0, M = 0$ ).....	66
Демонстрация волновой функции стандартного состояния атома азота с тремя р-электронами ( $L = 0, M = 0$ ) .....	67
2.1.3. Общая формулировка принципа исключения Паули (РЕР) .....	67
2.2. Постулат 2. Амплитуда вероятности .....	73
2.2.1. Вычисление радиальных волновых функций .....	74
2.2.2. Амплитуда вероятности для аниона водорода ( $H^-$ ).....	76
2.3. Постулат 3. Измеряемые величины и операторы .....	78
2.3.1. Оператор Эрмита .....	79
Запись матриц как суммы внешних произведений.....	80
2.3.2. Унитарный оператор .....	81
2.3.3. Матрица плотности и смешанные квантовые состояния .....	81
2.3.4. Использование операторов места ( $\hat{r}_x, \hat{r}_y, \hat{r}_z$ ) .....	83
2.3.5. Использование операторов импульса ( $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ ).....	84
2.3.6. Использование кинетической энергии с операторами кинетической энергии ( $\hat{T}_x, \hat{T}_y, \hat{T}_z$ ) .....	85
2.3.7. Использование потенциальной энергии с операторами потенциальной энергии ( $\hat{V}_x, \hat{V}_y, \hat{V}_z$ ) .....	87
2.3.8. Использование операторов общей энергии ( $\hat{E}_x, \hat{E}_y, \hat{E}_z$ ) .....	89
2.4. Постулат 4. Независимые от времени стационарные состояния .....	89
2.5. Постулат 5. Эволюция во времени, уравнение Шрёдингера.....	90
Вопросы .....	90
Ответы .....	90
Ссылки к главе .....	91

## Глава 3. Квантовая модель вычислений..... 92

Технические требования.....	94
Установка NumPy, Qiskit, QuTiP и импорт различных модулей .....	94
3.1. Кубиты, запутанность, сфера Блоха, матрицы Паули.....	95
3.1.1. Кубиты .....	96
3.1.2. Тензорное упорядочивание кубитов .....	96
3.1.3. Квантовая запутанность .....	97
3.1.4. Сфера Блоха .....	97
3.1.5. Отображение вектора Блоха, соответствующего вектору состояния .....	99
3.1.6. Матрицы Паули .....	101
Измерение в базисе знаков $\{ +\rangle,  -\rangle\}$ .....	103
Разложение матрицы на взвешенную сумму тензорного произведения матриц Паули .....	104
3.2. Квантовые затворы.....	105
3.2.1. Однокубитные квантовые затворы.....	106
Х-затвор .....	106
Затвор Адамара (H) .....	106
Общий однокубитный квантовый затвор .....	107
Сводка по квантовым затворам с одним кубитом и полезным соотношениям .....	107

3.2.2. Двухкубитные квантовые затворы .....	109
3.2.3. Трехкубитные квантовые затворы.....	109
3.2.4. Последовательные линейные затворы и параллельные квантовые затворы.....	109
3.2.5. Создание состояния Белла.....	110
3.2.6. Параллельные затворы Адамара .....	113
3.3. Вычисляемая интерференция.....	114
3.3.1. Процесс квантовых вычислений .....	115
3.3.2. Моделирование интерферометрического зондирования квантовой суперпозиции состояний левого и правого энантиомеров .....	115
3.4. Подготовка перестановки симметричного или антисимметричного состояния .....	118
3.4.1. Создание случайных состояний .....	118
3.4.2. Создание квантовой схемы и инициализация кубитов.....	119
3.4.3. Создание схемы, которая обменивается двумя кубитами с управляемым затвором обмена.....	119
Программирование действия унитарного обмена .....	120
Вычисление конечного состояния, когда контрольный кубит $ q_0\rangle$ измерен в состоянии $ 0\rangle$ .....	121
Вычисление конечного состояния, когда контрольный кубит $ q_0\rangle$ измерен в состоянии $ 1\rangle$ .....	122
3.4.4. Поствыбор контрольного кубита в процессе получения требуемого состояния .....	122
3.4.5. Примеры конечных симметричных и антисимметричных состояний.....	125
Эксперимент по созданию симметричного состояния из состояния $ 10\rangle$ .....	126
Эксперимент по созданию антисимметричного состояния из состояния $ 10\rangle$ .....	127
Эксперимент по созданию симметричного состояния из кубитов, инициализированных случайными состояниями .....	128
Эксперимент по созданию антисимметричного состояния из кубитов, инициализированных случайными состояниями .....	129
Эксперимент по созданию симметричного состояния из состояния Белла $ \Phi_+\rangle$ .....	130
Ссылки к главе .....	132

## Глава 4. Молекулярный гамильтониан..... 133

Технические требования.....	134
Установка NumPy, Qiskit и импорт различных модулей.....	135
4.1. Приближение Борна–Оппенгеймера .....	137
4.2. Пространство Фока .....	139
4.3. Операторы создания и уничтожения фермионов .....	142
4.3.1. Оператор создания фермионов.....	142
4.3.2. Оператор уничтожения фермиона .....	143
4.4. Молекулярный гамильтониан в основе орбиталей Хартри–Фока .....	143
4.5. Базовые наборы.....	145

4.5.1. Орбитали слейтерского типа .....	145
4.5.2. Орбитали гауссова типа .....	147
4.6. Конструирование фермионного гамильтониана с помощью Qiskit Nature .....	149
4.6.1. Конструирование фермионного оператора Гамильтона молекулы водорода .....	150
4.6.2. Конструирование фермионного оператора Гамильтона молекулы гидрида лития .....	155
4.7. Сопоставления фермиона и кубита .....	158
4.7.1. Операторы создания и уничтожения кубитов (Qubit) .....	159
4.7.2. Преобразование Джордана–Вигнера .....	160
4.7.3. Преобразование четности .....	161
4.7.4. Преобразование Бравого–Китаева .....	162
4.8. Построение кубитного оператора Гамильтона с помощью Qiskit Nature .....	165
4.8.1. Конструирование кубитного оператора Гамильтона молекулы водорода .....	166
4.8.2. Конструирование кубитного оператора Гамильтона молекулы гидрида лития .....	168
Резюме .....	169
Вопросы .....	169
Ответы .....	169
Ссылки к главе .....	170

<b>Глава 5. Вариационный алгоритм квантовых собственных чисел (ВАКСЧ) (VQE) .....</b>	<b>173</b>
Технические требования .....	174
Установка NumPy, Qiskit, QuTiP и импорт различных модулей .....	175
5.1. Вариационный метод .....	178
5.1.1. Вариационная теорема Рэля–Ритца .....	178
5.1.2. Вариационные методы Монте-Карло .....	179
5.1.3. Оценка квантовой фазы (QPE) .....	184
5.1.4. Описание алгоритма VQE (квантовых собственных чисел) .....	186
Тестовая волновая функция .....	187
Настройка решателя VQE .....	188
5.2. Пример химических расчетов .....	189
5.2.1. Молекула водорода (H <sub>2</sub> ) .....	196
Вариация водородной молекулы .....	196
Вычисление основного состояния .....	197
Вычисление BOPEs .....	201
5.2.2. Молекула гидрида лития .....	202
Вариация молекулы гидрида лития .....	202
Решение для основного состояния .....	202
Вычисление BOPEs .....	206
5.2.3. Макромолекула .....	206
Решение для основного состояния .....	209

Вычисление BOPEs .....	212
Резюме .....	212
Вопросы .....	213
Ответы .....	213
Ссылки к главе .....	213
<b>Глава 6. За пределами модели Борна–Оппенгеймера .....</b>	<b>217</b>
Технические требования .....	218
Установка NumPy, SimPy и математических модулей .....	219
6.1. Молекулярный гамильтониан, отличный от приближения Борна–Оппенгеймера .....	219
Внутренний оператор Гамильтона .....	221
Явно коррелированные гауссовы функции для всех частиц .....	222
Минимизация энергии .....	222
6.2. Расчет частот колебаний .....	224
Моделирование колебательно-вращательных уровней двухатомной молекулы .....	224
Вычисление всех вибрационно-вращательных уровней молекулы .....	228
Оптимизация геометрии молекулы .....	228
Расчет силовых констант матрицы Гессе .....	229
Преобразование в декартовы координаты, взвешенные с учетом массы .....	229
Диагонализация массово-взвешенной матрицы Гессе .....	229
6.3. Анализ колебательного спектра орто- и параизомеров молекулы водорода .....	231
Резюме .....	233
Вопросы .....	234
Ответы .....	234
Ссылки к главе .....	234
<b>Глава 7. Заключение .....</b>	<b>237</b>
7.1. Квантовые вычисления .....	237
7.2. Квантовая химия .....	238
Ссылки к главе .....	239
<b>Глоссарий .....</b>	<b>241</b>
<b>Приложение А. Основные математические понятия .....</b>	<b>250</b>
<b>Приложение В. Использование Jupyter Notebooks в облаке .....</b>	<b>271</b>
<b>Приложение С. Используемые торговые марки .....</b>	<b>275</b>
<b>Приложение D. Литература на русском языке по теме книги ...</b>	<b>276</b>
<b>Предметный указатель .....</b>	<b>277</b>