**量子计算化学进展**

方维海

北京师范大学化学学院 北京 100875

1982年Feynman首次提出了“量子计算”的概念，随后不久Grover发展的量子搜寻算法和Shor建立的素数分解量子算法，证明量子计算具有优越性。近年来，国内外物理学家的努力，推动了量子计算机技术的快速发展，使量子计算成为诸多领域关注的热点；同时针对玻色采样问题，利用光子和超导量子处理器，已经实现了量子计算的优势，展示了量子计算超越经典计算的巨大潜力。伴随着量子计算机技术的发展，量子计算化学应运而生。目前量子计算化学的核心研究内容是：（1）针对近期量子计算机的性能，发展新的量子算法，探索量子计算能不能解决化学、生物和材料的实际问题；（2）探索量子计算对哪些化学、生物和材料的问题能够实现量子加速。在此次汇报交流中，将概要介绍量子计算基础，基本的量子相位估计算法和变分量子响应算法，以及氮烯顺反异构、多并苯吸收光谱和一氧化碳X-射线吸收谱的量子计算，透视量子计算化学的进展。

**报告人简介：**

方维海, 北京师范大学化学学院教授。1982年本科毕业于安徽阜阳师范学院化学系，1993年在北京师范大学化学学院，获得理学博士学位；随后到南京大学从事博士后研究工作。1996年获得洪堡基金的资助，在德国波恩大学理论化学所，主要开展小分子光解离动态学的理论研究。1998年回到北京师范大学工作，主要从事光化学、光生物和材料光响应过程的理论和计算模拟，在多电子态势能面交叉、量子-经典混合的非绝热动力学模拟和羰基化合物光解离机理等方面做出了一些贡献；近年来开展了激发态、光谱及光化学的量子计算。2013年当选中国科学院院士，2020年获得亚太理论及计算化学家协会的Fukui奖章。目前是北京化学会理事长；中国化学会常务理事。