

(12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织
国际局

(43) 国际公布日
2024 年 12 月 12 日 (12.12.2024)



(10) 国际公布号
WO 2024/250170 A1

- (51) 国际专利分类号:
G16C 20/20 (2019.01)
- (21) 国际申请号: PCT/CN2023/098572
- (22) 国际申请日: 2023 年 6 月 6 日 (06.06.2023)
- (25) 申请语言: 中文
- (26) 公布语言: 中文
- (71) 申请人: 中国科学技术大学 (UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY OF CHINA) [CN/CN]; 中国安徽省合肥市包河区金寨路 96 号, Anhui 230026 (CN)。
- (72) 发明人: 尚仲夏 (SHANG, Zhongxia); 中国安徽省合肥市包河区金寨路 96 号, Anhui 230026 (CN)。陈明城 (CHEN, Mingcheng); 中国安徽省合肥市包河区金寨路 96 号, Anhui 230026 (CN)。陆

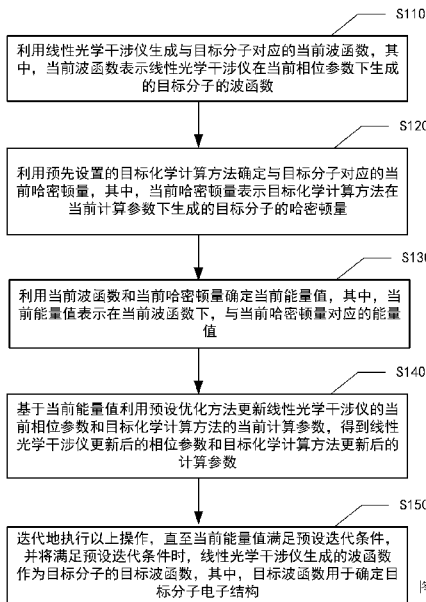
朝阳 (LU, Chaoyang); 中国安徽省合肥市包河区金寨路 96 号, Anhui 230026 (CN)。潘建伟 (PAN, Jianwei); 中国安徽省合肥市包河区金寨路 96 号, Anhui 230026 (CN)。

(74) 代理人: 中科专利商标代理有限责任公司 (CHINA SCIENCE PATENT & TRADEMARK AGENT LTD.); 中国北京市海淀区西三环北路 87 号 4-312 室, Beijing 100089 (CN)。

(81) 指定国 (除另有指明, 要求每一种可提供的国家保护): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA,

(54) Title: BOSON-SAMPLING-BASED ELECTRONIC STRUCTURE DETERMINATION METHOD AND APPLICATION THEREOF

(54) 发明名称: 基于玻色采样的电子结构的确定方法及应用



- S110 Use a linear optical interferometer to generate the current wave function corresponding to a target molecule, wherein the current wave function indicates a wave function of the target molecule that is generated by the linear optical interferometer under the current phase parameter
- S120 Use a preset target chemical calculation method to determine the current Hamiltonian corresponding to the target molecule, wherein the current Hamiltonian indicates a Hamiltonian of the target molecule that is generated by means of the target chemical calculation method under the current calculation parameter
- S130 Use the current wave function and the current Hamiltonian to determine the current energy value, wherein the current energy value indicates an energy value corresponding to the current Hamiltonian under the current wave function
- S140 On the basis of the current energy value, use a preset optimization method to update the current phase parameter of the linear optical interferometer and the current calculation parameter of the target chemical calculation method, so as to obtain an updated phase parameter of the linear optical interferometer and an updated calculation parameter of the target chemical calculation method
- S150 Iteratively execute said operations, until the current energy value meets a preset iteration condition, and when the preset iteration condition is met, use a wave function generated by the linear optical interferometer as a target wave function of the target molecule, wherein the target wave function is used for determining an electronic structure of the target molecule

(57) Abstract: Provided in the present disclosure are a Boson-sampling-based electronic structure determination method and the application thereof, which can be applied to the technical field of quantum computers. The determination method comprises: using a linear optical interferometer to generate the current wave function corresponding to a target molecule; using a preset target chemical calculation method to determine the current Hamiltonian corresponding to the target molecule; using the current wave function and the current Hamiltonian to determine the current energy value; on the basis of the current energy value, using a preset optimization method to update the current phase parameter of the linear optical interferometer and the current calculation parameter of the target chemical calculation method, so as to obtain an updated phase parameter of the linear optical interferometer and an updated calculation parameter of the target chemical calculation method; and iteratively executing said operations, until the current energy value meets a preset

PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW。

- (84) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的地区保护): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG)。

本国际公布:

— 包括国际检索报告(条约第21条(3))。

iteration condition, and when the preset iteration condition is met, using a wave function generated by the linear optical interferometer as a target wave function of the target molecule.

(57) 摘要: 本公开提供了一种基于玻色采样的电子结构的确定方法及应用, 可以应用于量子计算机技术领域。该确定方法包括: 利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数; 利用预先设置的目标化学计算方法确定与目标分子对应的当前哈密顿量; 利用当前波函数和当前哈密顿量确定当前能量值; 基于当前能量值利用预设优化方法更新线性光学干涉仪的当前相位参数和目标化学计算方法的当前计算参数, 得到线性光学干涉仪更新后的相位参数和目标化学计算方法更新后的计算参数; 以及迭代地执行以上操作, 直至当前能量值满足预设迭代条件, 并将满足预设迭代条件时, 线性光学干涉仪生成的波函数作为目标分子的目标波函数。

基于玻色采样的电子结构的确定方法及应用

技术领域

本公开涉及量子计算机技术领域，尤其涉及一种基于玻色采样的电子结构的确定方法及应用。

背景技术

量子计算机是利用量子态对信息进行编码和计算的设备。相对于传统计算机，由于量子叠加、量子纠缠等特点，其运算效率可以得到指数级的提升，在解决复杂问题方面具有潜在的应用价值。

相关技术中，对于电子结构问题一般采用经典化学计算方法通过量子计算机进行处理。先将待求解问题编码哈密顿量并通过参数化的量子线路制备量子态并利用经典优化算法优化目标函数。

在实现本公开发明构思的过程中，发明人发现相关技术中至少存在以下问题：采用相关技术中对电子结构问题的处理方法存在求解精度较低的问题。

发明内容

针对上述技术问题，本公开提供了一种基于玻色采样的电子结构的确定方法及应用，以至少部分地解决上述技术问题中的至少之一。

为了解决上述技术问题，本公开的技术方案如下：

作为本公开的一方面，提供一种基于玻色采样的电子结构的确定方法，包括：

利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数，其中，上述当前波函数表示上述线性光学干涉仪在当前相位参数下生成的上述目标分子的波函数；

利用预先设置的目标化学计算方法确定与上述目标分子对应的当前哈密顿量，其中，上述当前哈密顿量表示上述目标化学计算方法在当前计算参数下生成的上述目标分子的哈密顿量；

利用上述当前波函数和上述当前哈密顿量确定当前能量值，其中，上述当前能量值表示在上述当前波函数下，与上述当前哈密顿量对应的能量值；

基于上述当前能量值利用预设优化方法更新上述线性光学干涉仪的当前相位参数和上述目标化学计算方法的当前计算参数，得到上述线性光学干涉仪更新后的相位参数和上述目标化学计算方法更新后的计算参数；以及

迭代地执行以上操作，直至当前能量值满足预设迭代条件，并将满足上述预设迭代条件

时，上述线性光学干涉仪生成的波函数作为上述目标分子的目标波函数，其中，上述目标波函数用于确定上述目标分子的电子结构。

根据本公开的实施例，上述方法还包括：

根据上述目标分子的电子结构确定与上述目标分子对应的初始哈密顿量和初始参考态；

其中，上述利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数包括：

利用上述线性光学干涉仪更新上述初始参考态，得到上述当前波函数；

上述利用预先设置的目标化学计算方法确定与上述目标分子对应的当前哈密顿量包括：

利用上述目标化学计算方法对上述初始哈密顿量进行变换，得到上述当前哈密顿量。

根据本公开的实施例，上述利用上述线性光学干涉仪更新上述初始参考态，得到上述当前波函数包括：

根据上述初始参考态确定上述线性光学干涉仪的初始光源输入信息；

根据上述初始光源输入信息向上述线性光学干涉仪中输入单光子源，输出上述当前波函数。

根据本公开的实施例，利用上述当前波函数和上述当前哈密顿量确定当前能量值包括：

利用零差测量方法测量上述当前波函数的信息；

根据上述当前波函数的信息与上述哈密顿量确定当前能量值。

根据本公开的实施例，上述方法还包括：

在上述利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数之前，随机生成一组相位参数，得到初始相位参数；

将上述初始相位参数作为上述线性光学干涉仪的当前相位参数。

根据本公开的实施例，上述方法还包括：

在利用预先设置的目标化学计算方法确定与上述目标分子对应的当前哈密顿量之前，随机生成一组计算参数，得到初始计算参数；

将上述初始计算参数作为上述目标化学计算方法的当前计算参数。

根据本公开的实施例，上述线性光学干涉仪的相位参数包括以下至少之一：波片角度、波片位置、透射率。

根据本公开的实施例，上述预设优化方法包括：梯度下降法、粒子群游泳法或二阶拟牛顿法。

根据本公开的实施例，上述目标化学计算方法包括：哈特利-福克方法、耦合簇或密度泛函。

作为本公开的另一方面，提供一种利用上述方法得到的目标波函数预测上述目标分子的

化学反应速率的方法。

根据本公开的实施例，通过利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数，并利用预先设置的目标化学计算方法确定与目标分子对应的当前哈密顿量；之后利用当前波函数和当前哈密顿量确定在当前波函数下与当前哈密顿量对应的当前能量值；之后通过优化当前能量值更新线性干涉仪和目标化学计算方法的参数；按照上述方法经过多次迭代后，将线性干涉仪生成的波函数作为目标分子的目标波函数。由于本公开的实施例案通过基于线性光学的玻色采样量子计算机与量子计算化学方法相结合，使得玻色取样中的玻色子资源可以增强经典化学计算方法的精确度，从而提高电子结构问题的求解精度。

附图说明

图 1 示意性示出了根据本公开实施例的电子结构的确定方法的流程图；

图 2 示意性示出了根据本公开另一实施例的电子结构的确定方法的流程图；

图 3 示意性示出了根据本公开实施例的电子结构的确定方法的原理图；以及

图 4 示意性示出了采用不同方法得到的求解结果示意图。

具体实施方式

以下，将参照附图来描述本公开的实施例。但是应该理解，这些描述只是示例性的，而并非要限制本公开的范围。在下面的详细描述中，为便于解释，阐述了许多具体的细节以提供对本公开实施例的全面理解。然而，明显地，一个或多个实施例在没有这些具体细节的情况下也可以被实施。此外，在以下说明中，省略了对公知结构和技术的描述，以避免不必要地混淆本公开的概念。

在此使用的术语仅仅是为了描述具体实施例，而并非意在限制本公开。在此使用的术语“包括”、“包含”等表明了所述特征、步骤、操作和/或部件的存在，但是并不排除存在或添加一个或多个其他特征、步骤、操作或部件。

在此使用的所有术语（包括技术和科学术语）具有本领域技术人员通常所理解的含义，除非另外定义。应注意，这里使用的术语应解释为具有与本说明书的上下文相一致的含义，而不应以理想化或过于刻板的方式来解释。

在使用类似于“A、B 和 C 等中至少一个”这样的表述的情况下，一般来说应该按照本领域技术人员通常理解该表述的含义来予以解释（例如，“具有 A、B 和 C 中至少一个的系统”应包括但不限于单独具有 A、单独具有 B、单独具有 C、具有 A 和 B、具有 A 和 C、具有 B 和 C、和/或具有 A、B、C 的系统等）。

量子计算机是利用量子态对信息进行编码和计算的设备。相对于传统计算机，由于量子叠加、量子纠缠等特点，其运算效率可以得到指数级的提升，在解决复杂问题方面具有潜在的应用价值。目前，基于线性光学的玻色采样量子专用计算机已经受到科研以及企业领域广泛关注。

相关技术中，对于电子结构问题一般采用经典化学计算方法通过量子计算机进行处理。经典-量子混合变分算法特别是变分量子基态求解算法属于为数不多的可在目前量子计算机上运行的算法。变分量子基态求解算法一般先将待求解问题编码哈密顿量并通过参数化的量子线路制备量子态并利用经典优化算法优化目标函数。

但是，量子计算化学问题的精确求解对应经典计算机需要指数大的资源消耗，且相关技术中对电子结构问题的处理方法存在求解精度较低的问题。

有鉴于此，本公开针对以上技术问题，提供了一种基于玻色采样的电子结构的确定方法，包括：利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数，其中，上述当前波函数表示上述线性光学干涉仪在当前相位参数下生成的上述目标分子的波函数；利用预先设置的目标化学计算方法确定与上述目标分子对应的当前哈密顿量，其中，上述当前哈密顿量表示上述目标化学计算方法在当前计算参数下生成的上述目标分子的哈密顿量；利用上述当前波函数和上述当前哈密顿量确定当前能量值，其中，上述当前能量值表示在上述当前波函数下，与上述当前哈密顿量对应的能量值；基于上述当前能量值利用预设优化方法更新上述线性光学干涉仪的当前相位参数和上述目标化学计算方法的当前计算参数，得到上述线性光学干涉仪更新后的相位参数和上述目标化学计算方法更新后的计算参数；以及迭代地执行以上操作，直至当前能量值满足预设迭代条件，并将满足上述预设迭代条件时，上述线性光学干涉仪生成的波函数作为上述目标分子的目标波函数。

图1示意性示出了根据本公开实施例的电子结构的确定方法的流程图。

如图1所示，该实施例的电子结构的确定方法包括操作S110-操作S150。

在操作S110，利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数，其中，当前波函数表示线性光学干涉仪在当前相位参数下生成的目标分子的波函数。

根据本公开的实施例，线性光学干涉仪采用可编程的线性光学干涉仪，即线性光学干涉仪的相位参数可以调节。

根据本公开的实施例，当前相位参数包括能够影响目标分子的波函数的任意参数。由于不同的线性光学干涉仪的相位参数不同，本公开实施例不限定线性光学干涉仪的相位参数。

根据本公开的实施例，由于线性光学干涉仪生成的波函数与相位参数相关，则当前波函数与线性光学干涉仪的当前相位参数相对应。

在其中一个实施例中，线性光学干涉仪的相位参数可以包括波片角度、波片位置、透射率中的至少之一。

在操作 S120，利用预先设置的目标化学计算方法确定与目标分子对应的当前哈密顿量，其中，当前哈密顿量表示目标化学计算方法在当前计算参数下生成的目标分子的哈密顿量。

根据本公开的实施例，目标化学计算方法可以包括任意经典化学计算方法。例如，目标化学计算方法可以包括哈特里-福克（Hartree-Fock）方法、耦合簇或密度泛函中的至少之一。

在操作 S130，利用当前波函数和当前哈密顿量确定当前能量值，其中，当前能量值表示在当前波函数下，与当前哈密顿量对应的能量值。

在操作 S140，基于当前能量值利用预设优化方法更新线性光学干涉仪的当前相位参数和目标化学计算方法的当前计算参数，得到线性光学干涉仪更新后的相位参数和目标化学计算方法更新后的计算参数。

根据本公开的实施例，预设优化方法例如可以包括：梯度下降法、粒子群游泳法或二阶拟牛顿法。

在操作 S150，迭代地执行以上操作，直至当前能量值满足预设迭代条件，并将满足预设迭代条件时，线性光学干涉仪生成的波函数作为目标分子的目标波函数，其中，目标波函数用于确定目标分子的电子结构。

根据本公开的实施例，预设迭代条件例如可以包括当前能量值达到阈值或收敛。

根据本公开的实施例，通过利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数，并利用预先设置的目标化学计算方法确定与目标分子对应的当前哈密顿量；之后利用当前波函数和当前哈密顿量确定在当前波函数下与当前哈密顿量对应的当前能量值；之后通过优化当前能量值更新线性干涉仪和目标化学计算方法的参数；按照上述方法经过多次迭代后，将线性干涉仪生成的波函数作为目标分子的目标波函数。由于本公开的实施例案通过基于线性光学的玻色采样量子计算机与量子计算化学方法相结合，使得玻色取样中的玻色子资源可以增强经典化学计算方法的精确度，从而提高电子结构问题的求解精度。

根据本公开的实施例，上述方法还包括：根据目标分子的电子结构确定与目标分子对应的初始哈密顿量和初始参考态；其中，利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数包括：利用线性光学干涉仪更新初始参考态，得到当前波函数；利用预先设置的目标化学计算方法确定与目标分子对应的当前哈密顿量包括：利用目标化学计算方法对初始哈密顿量进行变换，得到当前哈密顿量。

根据本公开的实施例，根据目标分子的电子结构确定与目标分子对应的初始哈密顿量例如可以根据电子结构利用任意经典化学方法确定的哈密顿量。例如，利用哈特里-福克方法确

定目标分子的初始哈密顿量, 或者利用耦合簇或密度泛函方法确定目标分子的初始哈密顿量。

根据本公开的实施例, 初始参考态可以是与目标分子的目标波函数近似的波函数。

根据本公开的实施例, 根据目标分子的电子结构确定与目标分子对应的初始参考态例如可以根据电子结构人为确定与目标分子对应的初始参考态, 也可以利用线性光学干涉仪生成的与目标分子对应的初始参考态。

根据本公开的实施例, 利用线性光学干涉仪更新初始参考态, 得到当前波函数包括: 根据初始参考态确定线性光学干涉仪的初始光源输入信息; 根据初始光源输入信息向线性光学干涉仪中输入单光子源, 输出当前波函数。

根据本公开的实施例, 初始光源输入信息例如可以包括单光子源所处的轨道位置信息。

根据本公开的实施例, 上述方法还包括: 在利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数之前, 需要初始化线性干涉仪的相位参数。初始化线性干涉仪的相位参数的方法可以包括: 随机生成一组相位参数, 得到初始相位参数; 将初始相位参数作为线性光学干涉仪的当前相位参数。

根据本公开的实施例, 上述方法还包括: 在利用预先设置的目标化学计算方法确定与目标分子对应的当前哈密顿量之前, 需要初始化目标化学计算方法的计算参数。初始化目标化学计算方法的计算参数可以包括: 随机生成一组计算参数, 得到初始计算参数; 将初始计算参数作为目标化学计算方法的当前计算参数。

根据本公开的实施例, 利用当前波函数和当前哈密顿量确定当前能量值包括: 利用零差测量方法测量当前波函数的信息; 根据当前波函数的信息与哈密顿量确定当前能量值。

图 2 示意性示出了根据本公开另一实施例的电子结构的确定方法的流程图。

如图 2 所示, 该实施例的电子结构的确定方法包括操作 S201-操作 S212。

在操作 S201, 根据目标分子的电子结构确定与目标分子对应的初始哈密顿量和初始参考态。

在操作 S202, 随机生成一组相位参数, 得到初始相位参数。

在操作 S203, 将初始相位参数作为线性光学干涉仪的当前相位参数。

在操作 S204, 利用线性光学干涉仪更新初始参考态, 得到当前波函数。

在操作 S205, 利用零差测量方法测量当前波函数的信息。

在操作 S206, 随机生成一组计算参数, 得到初始计算参数。

在操作 S207, 将初始计算参数作为目标化学计算方法的当前计算参数。

在操作 S208, 利用目标化学计算方法对初始哈密顿量进行变换, 得到当前哈密顿量。

在操作 S209, 根据当前波函数的信息与哈密顿量确定当前能量值。

在操作 S210, 判断当前能量值是否满足预设迭代条件。在确定当前能量值满足预设迭代条件的情况下, 执行操作 S211; 在确定当前能量值不满足预设迭代条件的情况下, 执行操作 S212。

在操作 S211, 将满足预设迭代条件时, 线性光学干涉仪生成的波函数作为目标分子的目标波函数。

在操作 S212, 基于当前能量值利用预设优化方法更新线性光学干涉仪的当前相位参数和目标化学计算方法的当前计算参数, 得到线性光学干涉仪更新后的相位参数和目标化学计算方法更新后的计算参数, 之后执行操作 S204-操作 S210。

根据本公开的实施例, 电子结构问题属于费米子, 线性光学属于玻色子, 本方案通过将每个玻色子轨道的 0, 1 光子占据态对应费米子轨道的 0, 1 电子占据态, 将玻色采样与量子计算化学的结合, 使得玻色子资源可以增强经典计算化学方法的精确度, 从而提高电子结构问题的求解精度。

图 3 示意性示出了根据本公开实施例的电子结构的确定方法的原理图。

如图 3 所示, 根据目标分子的电子结构问题 301 进行二次量子化即选择基矢组 302 的过程, 得到二次量子化哈密顿量 303 和初始参考态 304; 然后二次量子化哈密顿量 303 经过经典化学计算方法 305 计算输出变换哈密顿量 306 即当前哈密顿量; 同时, 初始参考态 304 输入线性光学干涉仪 307 中生成当前波函数 308; 之后根据变换哈密顿量 306 和当前波函数 308 利用零差测量方法 309 确定当前能量值 310; 基于当前能量值 310 利用经典优化方法 311 优化线性光学干涉仪 307 的相位参数和经典化学方法 305 的计算参数。迭代地执行上述步骤, 直至当前能量值 310 达到阈值或收敛, 并将当前能量值 310 达到阈值或收敛时, 线性光学干涉仪 307 生成的波函数作为目标分子的目标波函数。

需要说明的是, 经典化学计算方法 305 可以采用哈特里-福克方法 ($V_{HF}(\vec{\beta})$)、组态相互作用方法 $V_{CISD}(\vec{\beta})$; 线性光学干涉仪 307 可以采用 $U_B(\vec{\alpha})$ 表示。

根据本公开的实施例, 变换哈密顿量 306 例如可以采用公式 (1) 确定。

$$H_F^t(\vec{\beta}) = V^\dagger(\vec{\beta}) H^r V(\vec{\beta}) \quad (1);$$

其中,

β 表示经典化学计算方法中的计算参数;

$V(\vec{\beta})$ 表示经典化学计算方法;

$H_F^t(\vec{\beta})$ 表示变换哈密顿量;

$V^1(\vec{\beta})$ 表示经典化学计算方法 $V(\vec{\beta})$ 的转置共轭。

下面以具体实施例对上述电子结构的确定方法做进一步解释。

实施例

该实施例以氢化锂分子为目标分子，利用本公开实施例提供的方法求解氢化锂分子的电子结构问题。其中，氢化锂分子的哈密顿量对应于模式 6 的线性光学干涉仪。同时，选用哈特里-福克方法作为经典化学计算方法。

对比例

利用相关技术求解氢化锂的电子结构问题，具体地，以哈特里-福克方法作为经典化学方法求解氢化锂的电子结构问题。

图 4 示意性示出了采用不同方法得到的求解结果示意图。

如图 4 所示，利用本公开实施例提供的方法得到的氢化锂的求解结果明显优于利用哈特里-福克方法作为经典化学计算方法得到的求解结果。因此，本公开的实施例提供的方法能够在玻色采样线性干涉仪的辅助下，增强经典计算化学方法的精确度。

根据本公开的另一方面，提供一种利用上述方法得到的目标波函数预测目标分子的化学反应速率的方法。

以上所述的具体实施例，对本公开的目的、技术方案和有益效果进行了进一步详细说明，应理解的是，以上所述仅为本公开的具体实施例而已，并不用于限制本公开，凡在本公开的精神和原则之内，所做的任何修改、等同替换、改进等，均应包含在本公开的保护范围之内。

权利要求

1. 一种基于玻色采样的电子结构的确定方法，包括：

利用的线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数，其中，所述当前波函数表示所述线性光学干涉仪在当前相位参数下生成的所述目标分子的波函数；

利用预先设置的目标化学计算方法确定与所述目标分子对应的当前哈密顿量，其中，所述当前哈密顿量表示所述目标化学计算方法在当前计算参数下生成的所述目标分子的哈密顿量；

利用所述当前波函数和所述当前哈密顿量确定当前能量值，其中，所述当前能量值表示在所述当前波函数下，与所述当前哈密顿量对应的能量值；

基于所述当前能量值利用预设优化方法更新所述线性光学干涉仪的当前相位参数和所述目标化学计算方法的当前计算参数，得到所述线性光学干涉仪更新后的相位参数和所述目标化学计算方法更新后的计算参数；以及

迭代地执行以上操作，直至当前能量值满足预设迭代条件，并将满足所述预设迭代条件时，所述线性光学干涉仪生成的波函数作为所述目标分子的目标波函数，其中，所述目标波函数用于确定所述目标分子的电子结构。

2. 根据权利要求 1 所述的方法，还包括：

根据所述目标分子的电子结构确定与所述目标分子对应的初始哈密顿量和初始参考态；

其中，所述利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数包括：

利用所述线性光学干涉仪更新所述初始参考态，得到所述当前波函数；

所述利用预先设置的目标化学计算方法确定与所述目标分子对应的当前哈密顿量包括：

利用所述目标化学计算方法对所述初始哈密顿量进行变换，得到所述当前哈密顿量。

3. 根据权利要求 2 所述的方法，其中，所述利用所述线性光学干涉仪更新所述初始参考态，得到所述当前波函数包括：

根据所述初始参考态确定所述线性光学干涉仪的初始光源输入信息；

根据所述初始光源输入信息向所述线性光学干涉仪中输入单光子源，输出所述当前波函数。

4. 根据权利要求 1 所述的方法，其中，利用所述当前波函数和所述当前哈密顿量确定当前能量值包括：

利用零差测量方法测量所述当前波函数的信息；

根据所述当前波函数的信息与所述哈密顿量确定当前能量值。

5.根据权利要求 1 所述的方法,还包括:

在所述利用线性光学干涉仪生成与目标分子对应的当前波函数之前,随机生成一组相位参数,得到初始相位参数;

将所述初始相位参数作为所述线性光学干涉仪的当前相位参数。

6.根据权利要求 1 所述的方法,还包括:

在利用预先设置的目标化学计算方法确定与所述目标分子对应的当前哈密顿量之前,随机生成一组计算参数,得到初始计算参数;

将所述初始计算参数作为所述目标化学计算方法的当前计算参数。

7.根据权利要求 1 所述的方法,其中,所述线性光学干涉仪的相位参数包括以下至少之一:波片角度、波片位置、透射率。

8.根据权利要求 1 所述的方法,其中,所述预设优化方法包括:梯度下降法、粒子群游泳法或二阶拟牛顿法。

9.根据权利要求 1 所述的方法,其中,所述目标化学计算方法包括:哈特里-福克方法、耦合簇或密度泛函。

10.一种利用权利要求 1~9 中任一项所述方法得到的目标波函数预测所述目标分子的化学反应速率的方法。

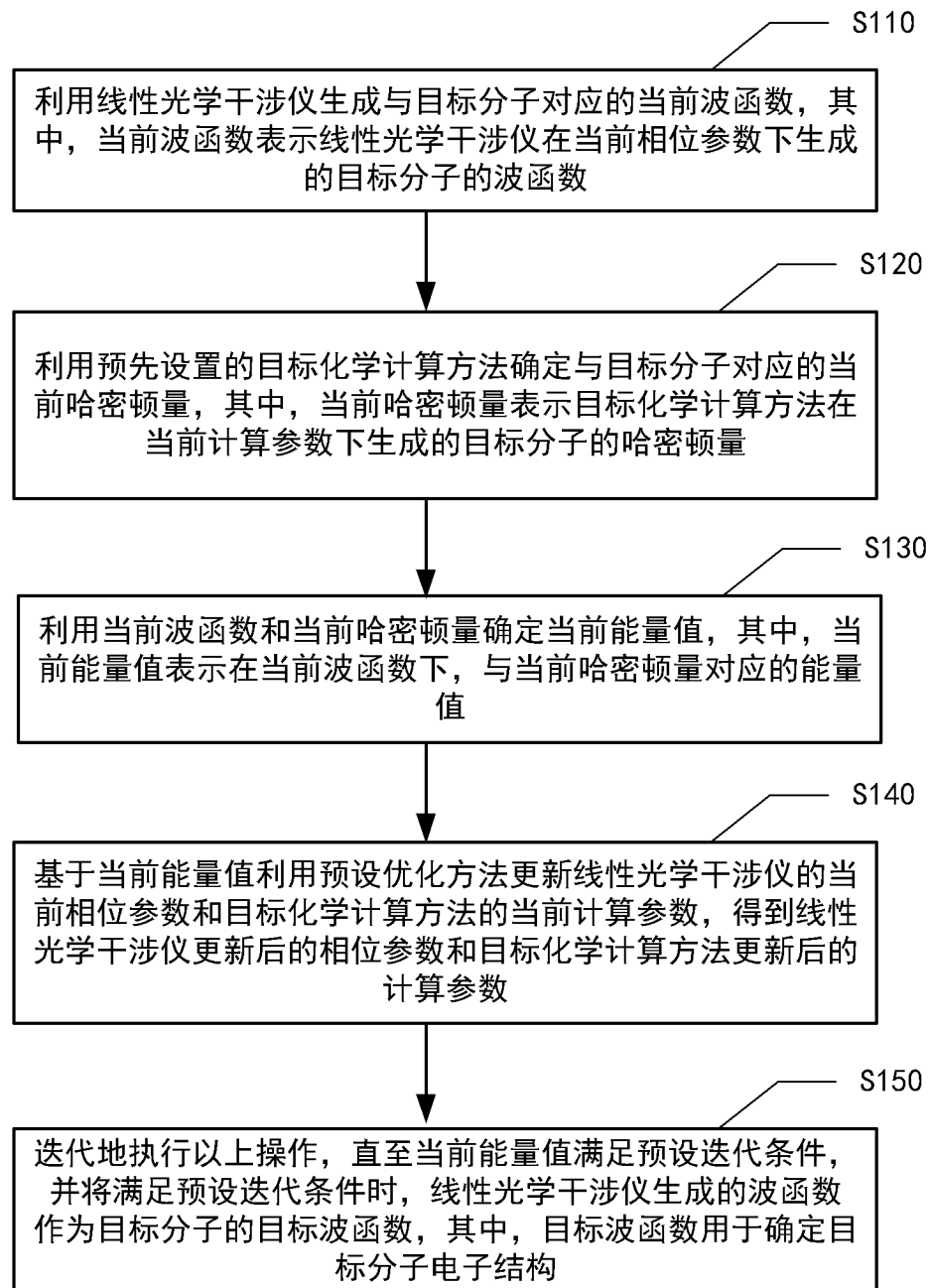


图 1

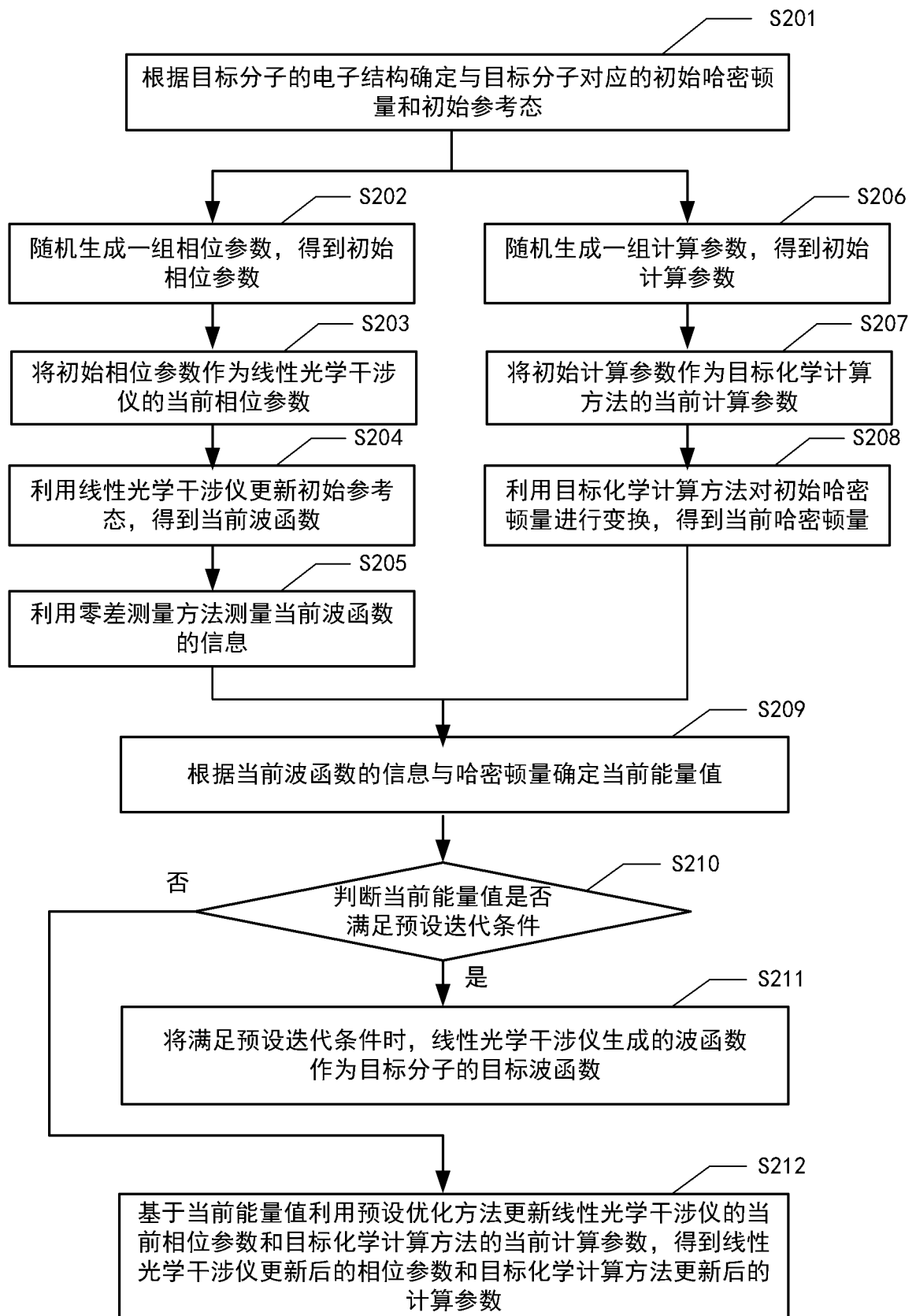


图 2

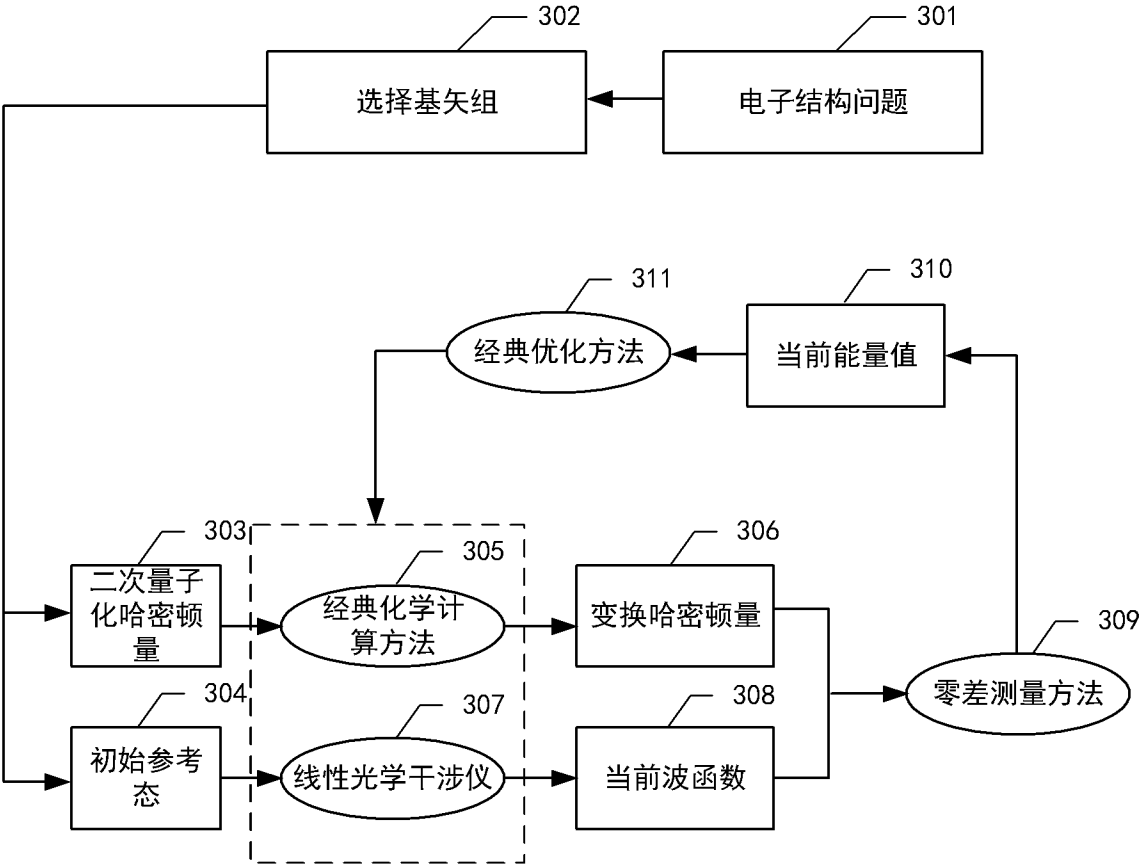


图 3

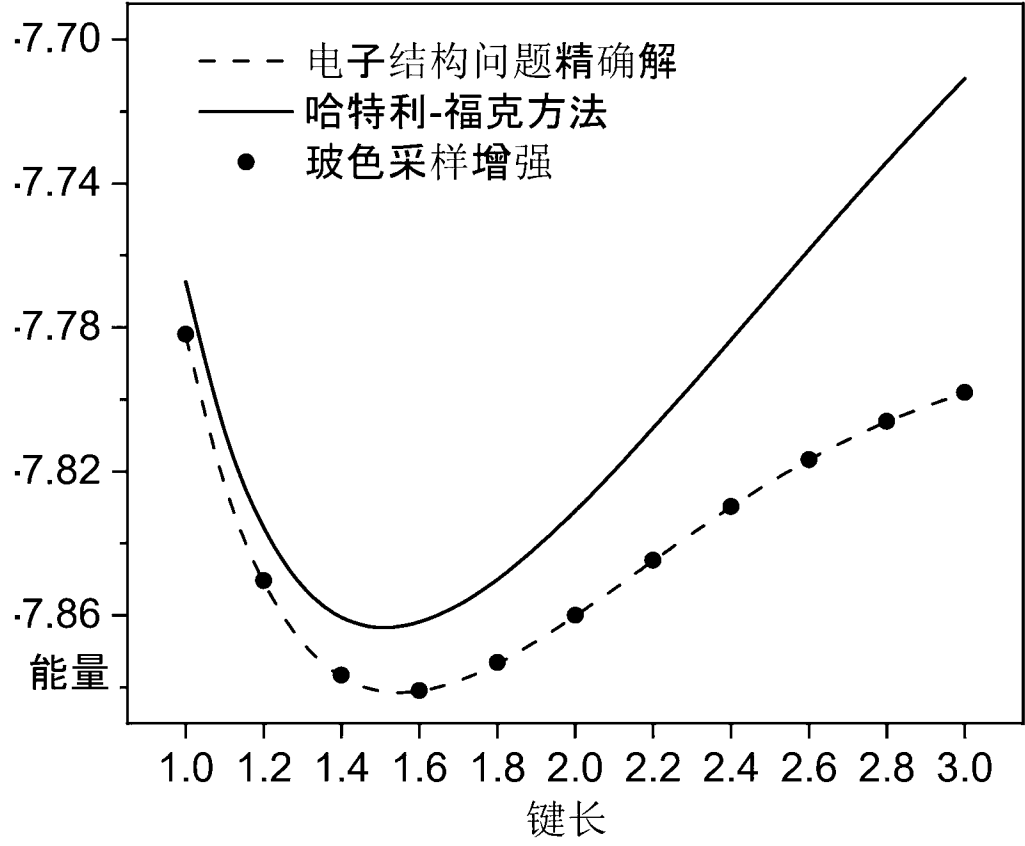


图 4

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/CN2023/098572

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G16C 20/20(2019.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

IPC: G16C, G06N

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

VEN, CNABS, CNTXT, WOTXT, EPTXT, USTXT, CNKI, IEEE: 电子, 分子, 结构, 确定, 波色采样, 波函数, 相位, 参数, 哈密顿量, 能量值, 光学干涉仪, electron, molecule, structure, determination, boson sampling, wave function, phase, parameter, hamiltonian, energy value, optical interferometer

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	CN 111656375 A (IQB INFORMATION TECHNOLOGIES INC.) 11 September 2020 (2020-09-11) description, paragraphs 57-108, and claims 1-16	1-10
A	CN 114528996 A (HEFEI ORIGIN QUANTUM COMPUTING TECHNOLOGY CO., LTD.) 24 May 2022 (2022-05-24) entire document	1-10
A	CN 115859597 A (UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY OF CHINA) 28 March 2023 (2023-03-28) entire document	1-10
A	CN 111599414 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 28 August 2020 (2020-08-28) entire document	1-10
A	CN 115169565 A (ZHEJIANG LAB et al.) 11 October 2022 (2022-10-11) entire document	1-10
A	US 2022138607 A1 (RIVER LANE RESEARCH LTD.) 05 May 2022 (2022-05-05) entire document	1-10

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.
 ☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
 “D” document cited by the applicant in the international application
 “E” earlier application or patent but published on or after the international filing date
 “L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
 “O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
 “P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

01 February 2024

Date of mailing of the international search report

06 February 2024

Name and mailing address of the ISA/CN

China National Intellectual Property Administration (ISA/
CN)
China No. 6, Xitucheng Road, Jimenqiao, Haidian District,
Beijing 100088

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/CN2023/098572

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
CN	111656375	A	11 September 2020	US	2020364601	A1	19 November 2020
				JP	2023139055	A	03 October 2023
				EP	3718060	A1	07 October 2020
				EP	3718060	A4	13 October 2021
				JP	2021504831	A	15 February 2021
				JP	7312173	B2	20 July 2023
				CA	3082937	A1	06 June 2019
				WO	2019104440	A1	06 June 2019
CN	114528996	A	24 May 2022	None			
CN	115859597	A	28 March 2023	None			
CN	111599414	A	28 August 2020	None			
CN	115169565	A	11 October 2022	None			
US	2022138607	A1	05 May 2022	None			

A. 主题的分类

G16C 20/20(2019.01)i

按照国际专利分类(IPC)或者同时按照国家分类和IPC两种分类

B. 检索领域

检索的最低限度文献(标明分类系统和分类号)

IPC: G16C, G06N

包含在检索领域中的除最低限度文献以外的检索文献

在国际检索时查阅的电子数据库(数据库的名称, 和使用的检索词(如使用))

VEN, CNABS, CNTXT, WOTXT, EPTXT, USTXT, CNKI, IEEE: 电子, 分子, 结构, 确定, 波色采样, 波函数, 相位, 参数, 哈密顿量, 能量值, 光学干涉仪, electron, molecule, structure, determination, boson sampling, wave function, phase, parameter, hamiltonian, energy value, optical interferometer

C. 相关文件

类型*	引用文件, 必要时, 指明相关段落	相关的权利要求
A	CN 111656375 A (1QB信息技术公司) 2020年9月11日 (2020 - 09 - 11) 说明书第57-108段, 权利要求1-16	1-10
A	CN 114528996 A (合肥本源量子计算科技有限责任公司) 2022年5月24日 (2022 - 05 - 24) 全文	1-10
A	CN 115859597 A (中国科学技术大学) 2023年3月28日 (2023 - 03 - 28) 全文	1-10
A	CN 111599414 A (清华大学) 2020年8月28日 (2020 - 08 - 28) 全文	1-10
A	CN 115169565 A (之江实验室 等) 2022年10月11日 (2022 - 10 - 11) 全文	1-10
A	US 2022138607 A1 (RIVER LANE RESEARCH LTD.) 2022年5月5日 (2022 - 05 - 05) 全文	1-10

☐ 其余文件在C栏的续页中列出。

☒ 见同族专利附件。

★ 引用文件的具体类型:

“A” 认为不特别相关的表示了现有技术一般状态的文件

“D” 申请人在国际申请中引证的文件

“E” 在国际申请日的当天或之后公布的在先申请或专利

“L” 可能对优先权要求构成怀疑的文件, 或为确定另一篇引用文件的公布日而引用的或者因其他特殊理由而引用的文件(如具体说明的)

“O” 涉及口头公开、使用、展览或其他方式公开的文件

“P” 公布日先于国际申请日但迟于所要求的优先权日的文件

“T” 在申请日或优先权日之后公布, 与申请不相抵触, 但为了理解发明之理论或原理的在后文件

“X” 特别相关的文件, 单独考虑该文件, 认定要求保护的发明不是新颖的或不具有创造性

“Y” 特别相关的文件, 当该文件与另一篇或者多篇该类文件结合并且这种结合对于本领域技术人员为显而易见时, 要求保护的发明不具有创造性

“&” 同族专利的文件

国际检索实际完成的日期

2024年2月1日

国际检索报告邮寄日期

2024年2月6日

ISA/CN的名称和邮寄地址

中国国家知识产权局
中国北京市海淀区蓟门桥西土城路6号 100088

授权官员

刘曼

电话号码 (+86) 010-53961297

PCT/ISA/210 表(第2页) (2022年7月)

国际检索报告
关于同族专利的信息

国际申请号

PCT/CN2023/098572

检索报告引用的专利文件			公布日 (年/月/日)	同族专利			公布日 (年/月/日)
CN	111656375	A	2020年9月11日	US	2020364601	A1	2020年11月19日
				JP	2023139055	A	2023年10月3日
				EP	3718060	A1	2020年10月7日
				EP	3718060	A4	2021年10月13日
				JP	2021504831	A	2021年2月15日
				JP	7312173	B2	2023年7月20日
				CA	3082937	A1	2019年6月6日
				WO	2019104440	A1	2019年6月6日
CN	114528996	A	2022年5月24日	无			
CN	115859597	A	2023年3月28日	无			
CN	111599414	A	2020年8月28日	无			
CN	115169565	A	2022年10月11日	无			
US	2022138607	A1	2022年5月5日	无			