

专业：化学

第一原理：物质是由分子（粒子）组成的。

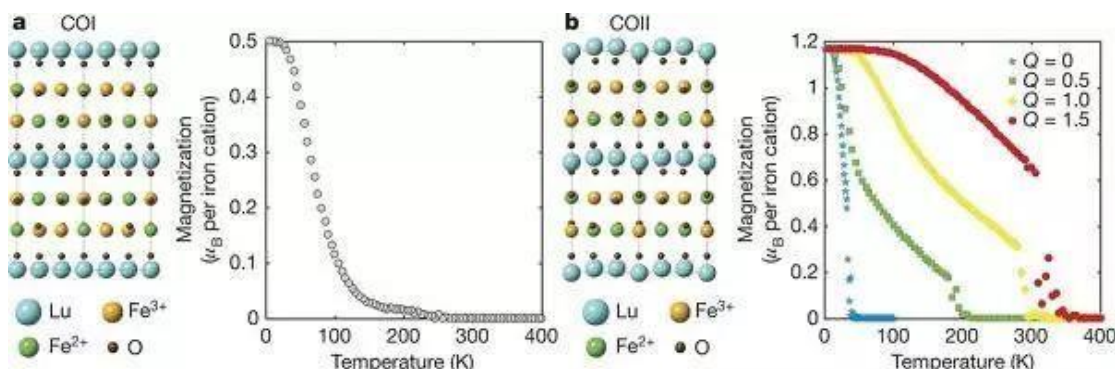
常用计算软件：ATK (Atomic Toolkit)、Gaussian、Comsol

计算问题：计算一个分子的分子轨道、光谱，计算一个分子异构化的动态过程，计算有机分子的最有可能的反应机理等等。

示例：

1: Nature: 康奈尔大学-通过原子尺度调控实现材料的室温铁电、多铁性

目前来自康奈尔大学的科学家 Darrell G. Schlom (通讯作者) 报道了一种构建室温条件下铁电和磁性耦合的单相多铁材料的新方法。作者采用 LuFe_2O_4 作为表面矩阵，在合成过程中引入特殊的 FeO 单层材料，这样实现了 $(\text{LuFeO}_3)_m/(\text{LuFe}_2\text{O}_4)_1$ 超晶胞的构建。由于相邻的 LuFeO_3 的表面严重的褶皱效应可以使得具有铁磁性的 LuFe_2O_4 产生同步的铁电性质，同时可以降低其电子自旋的无序性和不稳定性，这样大幅度得提高了磁性相变温度(从 $240\text{K}(\text{LuFe}_2\text{O}_4)$ 提高到了 $281\text{K}((\text{LuFeO}_3)_m/(\text{LuFe}_2\text{O}_4)_1)$)。此外，铁电序参量和铁磁序参量相互耦合，可以实现之间的在 200K 温度条件下电场对于磁性的调控。该研究也很好得阐释了该合成方案的设计可以很好得制备出具有较高温条件下磁电耦合的多铁材料，并且很好得利用了该类材料的几何不稳定性、晶格的变形以及外延生长技术，成功设计出理想的磁电耦合材料。



第一性原理计算出的 LuFe_2O_4 的自旋结果

a,b,单斜结构的 LuFe_2O_4 系统的结构图， $\text{Fe}^{2+} / \text{Fe}^{3+}$ 为反铁电状态 (a: 空间群: $C2/m$) 以及铁电状态 (b: 空间群: Cm)。每个铁离子的饱和磁化强度在右图中计算出来 (关于温度的函数)。对于铁电状态的 LuFe_2O_4 的温度 - 每个铁离子的饱和磁化强度计算出来作为 Q 的函数，结果显示磁性相变温度随着结构的畸变程度而不断增加。

2: Nature: 复合无机物相场的两种晶体结构类型的加速发现

受限于材料既有大量可能的元素组成，也有庞大的潜在结构，所以探索研发新材料一直没有一个很好的办法。例如，无机结构拓展到固相结构的研究发现大部分都是依赖于晶体化学以及耗费大量时间的系统改变元素比值的材料合成。计算方法已经发展到通过精确成分预测结构和已知晶体结构预测成分来指导材料合成，并已经取得了巨大进步。然而要得到一个全新、实验上可实现的物质，其包括晶胞和原子位置在内的晶体结构迥异于已知晶体结构，仍然是一个巨大的挑战。很多有价值的性能得益于对已知结构的替换。但仅仅使用这种方法将带来错过最优性能解以及试图利用不完整知识来设计的风险。

本文报道了实验发现的两种结构，其通过对同时包含两种结构的复杂无机相区域进行计算识别得到的。

通过计算探测结构的结果是获得了该系统化学、结构上的多样性，其能量可以与已知材料组合相当。接着对相图中最低能量区域计算得到之前未有报道过的结构的两种材料。

3: Google 首次实现使用量子计算机对化学反应进行模拟

Google 量子研究团队宣布其在量子计算机上模拟了迄今最大规模的化学反应。相关成果登上了《科学》杂志的封面，题为《超导量子比特量子计算机的 Hartree-Fock 近似模拟》(Hartree-Fock on a Superconducting Qubit Quantum Computer)。



根据化学反应过程的量子力学定律对化学反应过程进行精确的计算预测，可以解锁新的化学领域，改善现有工业。可惜的是，由于量子变量的数量和统计量呈指数级扩大，除了最小的系统之外，所有其他量子化学方程的精确解仍然无法用现代经典计算机得到。

与此同时，原子和分子之间受量子力学控制，因此量子计算机有望成为精确模拟它们的最佳方法。也就是说，通过使用量子计算机，利用其独特的量子力学特性来处理经典计算机难以处理的计算，可以实现对复杂化学反应过程的模拟。

为了完成这项最新成果，研究人员使用 Sycamore 处理器，模拟了一个由两个氮原子和两个氢原子组成的二氮烯分子的异构化反应。最终，量子模拟与研究人员在经典计算机上进行的模拟一致，验证了他们的工作。