**PPT4**

1 9 0 0年间,普朗克为了要解决辐射与周围物体处于平衡状态时的能量分布的黑体辐射问题,引进了能量分立值的量子观念和普朗克常数h。因此,我们通常都说量子力学诞生在这一年。事实上,普朗克创立能量分立值的观念后,还经过相当长的一段发展时期,才真正建立目前的量子力学。1 9 0 5年,爱因斯坦首先引伸普朗克的观念,创立光子(或光量子)说,

而成功地解释了光电效应。玻尔在1913年更进一步利用能量分立观念,建立了原子模型理 论基础,并解释了氢原子光谱。人们称玻尔的原子理论为旧量子理论。现代量子力学的建立

,直到1924年德布罗意提出电子和所有微观粒子具有波粒二象性后,才真正开始。1 9 2 5到1 9 2 6年间,海森伯和薛定愕分别提出了较为完整的描述微观粒子运动规律的矩阵力学和波动力学。1 9 2 7年薛定愕证明了矩阵力学和波动力学应用到微观粒子运动上得到相同

结果;只是矩阵力学用的数学工具是矩阵代数,而波动力学用的数学工具是微分方程和偏微分方程。 1 9 2 9年笛拉克建立了现代量子力学的一般形式。从此人们把描述微观世界的力学称为量子力学,而矩阵力学和波动力学只是量子力学的两个不同的特殊形式。

**PPT5**

当然了，真正的量子力学发展并不像我上面所描述的那样自然而然，恰恰相反，这一过程充满惊奇与意外，借用《上帝掷骰子吗》一书序言中的描述：这个故事更像一个传奇，由一个不起眼的线索开始，曲径通幽，渐渐地落英缤纷，乱花迷眼。正在没头绪时，突然间峰回路转，天地开阔，如河出伏流，一泻汪洋，但还未来得及一览美景，转眼间又大起大落，误入白云深处不知归路……

量子力学的发展史是物理学上最激动人心的篇章，我们看到了物理大厦在狂风暴雨下轰然倒塌，却又在熊熊烈火中得到了洗礼和重生。我们看到了最革命的思潮席卷大地，带来了让人惊骇的电闪雷鸣，同时却又展现出震撼人心的美丽。我们看到了科学如何在荆棘和沼泽中艰难的走来，却更加坚定了对胜利的信念！

**PPT6**

接着，就让我们进入小组报告的正文部分——量子力学在现实生话中的应用

其实啊，谈起量子力学在现实生活中的应用，相信不少人都会匪夷所思——像量子力学这种高深莫测的学问，这种存在于微观量子领域的神秘科学，会在我们的现实生活中有所应用？可别逗了。

哎，这可真不是逗你，自打20世纪初普朗克先生发现那个常数h算起，量子力学的发展怎么样也有100年的历史了，虽说到了现在，量子力学还有很大的空间需要人们去探索，但是这并不妨碍人们将已经得到的结论与实际的生产生活相结合。毕竟，任何科学的最终目的都是要服务于人的。下面我们一起来看一下量子力学的应用吧。

DOWLING等将量子技术分为五大类，分别为量子信息技术、量子电机系统、相干量子电动学、量子光学和相干物质技术。随着科学技术的快速发展，量子技术已涉及计算、信息、能源、医疗、军事探测等多个领域，成为众多学科的研究热点。我国于2014年成立中国科学院量子信息和量子科技前沿卓越创新中心，着重进行量子信息研究，以解决量子科技革命的前沿问题。目前，我国量子力学及量子技术在计算机、信息以及军事等领域的应用水平已居世界前列。

在我们的小组汇报中，我会简要介绍量子力学在生物医学，化学和通信技术三个领域的应用。

**PPT7**

首先，咱们来看看量子力学在生物医学方面的应用。

提到医学，无疑是和老百姓生活关系最紧密的一门自然科学，也是民生问题的重要体现之一。

医学自诞生到现在，少说也有几千年的历史，那么，这位“千岁长者”会与一百来岁的“量子力学”碰撞出怎样的火花呢？是火星撞地球般的声势浩大还是像溪流汇入大海那般静寂无声？

接下来，我们分别从临床医学和生物制药两个方面来看看这“爷孙俩”的奇妙相遇。

**PPT8**

首先，我们来看看临床。

根据量子物理学的理论，组成生命个体的分子也存在于基本粒子运动产生的微弱磁场中。科学家们认为可以应用量子力学原理来解释生物分子的结构功能和细胞的分化、遗传和变异等生命现象，由此产生了量子医学这一新兴学科。

其实在我看来，这两者的结合似乎是天经地义的，因为依人们的肉眼看，细胞和粒子都是微观不可见的事物，用更微观的粒子理论去解释细胞的生命历程似乎会更加合理。

量子医学可应用量子物理理论对生理现象进行建模，如WOOLF等[8]的视觉神经生理模型，他们应用现有的电子设备对生命个体进行研究[9]。20世纪20年代，美国学者Nelsem首先研制出人体超速扫描系统，可对机体进行多种物理参数测量，随后日本、韩国、德国等国家

相继研制出量子共振检测仪（quantum resonance spectrometer，QRS），使得量子能量检测成为临床医学的研究热点，在健康普查、过敏原识别、肿瘤[9]和精神疾病[10]研究中广泛应用。

试想一下，当量子医学发展成熟的那一天，你走进一家医院想做一个全身体检。你只需要站在量子的人体快速扫描仪前面几分钟，身体的各项数据指标都会清晰的呈现出来，再也不用被各个科室里眼花缭乱仪器设备整的头晕目眩。这么一来，不仅节省了时间，还省去了大量的人力。

当然，就目前情况来看，量子能量检测是否能够作为临床诊断的依据还饱受争议。在复杂的人体环境中，能否准确检测出微弱磁场环境下健康细胞与异常细胞的差异也是争议的核心问题。

这也说明，量子能量检测极有可能不能发现人体存在的癌细胞，但是对于人体其他方面的指标测定，还请我们拭目以待。

**PPT9**

接下来，让我们把目光转向药物设计

量子力学在药物设计中的应用主要体现在基于量子力学的药物设计和筛选。这种方法通过定量计算药物与靶分子的相互作用，再利用模拟药物在人体机体中的行为，进而得到药物的性质（模型）研究药效、药物代谢和药物毒性等。由于药物与靶分子之间的相互作用涉及到相当于在原子分子水平上的能量和相互作用特征，因此基于量子理论的药物设计和筛选最适合用于设计具有特定的生物学活性的药物。

量子力学与计算机辅助药物设计研究在寻找可以治愈各种新型疾病的药物方面至关重要。随着科学家对疾病研究的不断深入，现有的治疗药物需要不断更新、优化，这对治疗药物的设计和制备提出了更高的要求。

我们常常讲到对症下药，而以往的药物往往不能够深入到细胞内部对其进行靶向治疗，即使有少数这样的药物，价格也是高的惊人。于是科学家们便思考，我们能否发挥量子物理的优势，从微观的角度进行药物研制，用微观的思想设计药物，用量子的理论进行更为精密的测定。于是乎，在这样思想的引导之下，科学家们走上了用量子力学和计算机辅助药物设计的研究之路。

让我们来看一个例子。

L-色氨酸是维持人体正常氮平衡的必需氨基酸，吲哚胺2，3双加氧酶1（indoleamine 2， 3-dioxygenase 1，IDO1）是其代谢的关键限速酶。近年来，有研究发现*IDO*1基因表达与多种肿瘤（卵巢癌、子宫内膜癌、结直肠癌和肝细胞癌等）的不良预后相关[12-15]，因此IDO1抑制剂成为癌症治疗的新靶点。ZOU等[16]采用CADD对IDO1进行结构研究，应用诱导契合和分子动力学模拟原理系统阐述了IDO1与其抑制剂的结构及IDO1的配体结合模式。并在此基础上，进行量子力学计算和分析，通过分子静电势能计算、量子力学/分子动力学（quantum mechanics/molecular mechanics，QM/MM）计算和非键结合力计算，进一步解释了一些关键氨基酸残基在配体结合时的重要功能和作用。

应用这些方法进行药物设计不仅能加快新药设计的速度，提供全面的模拟结构功能信息，还

能节约大量的人力和物力。这种量子力学与分子动力学结合的方法被广泛应用于各种化学 过程的建模中，如化学反应机制研究[17-18]、氨基酸及蛋白质的能量和结构分析[19-20]、药物开

发[16，21]等，为处理庞大且复杂的体系奠定了基础。

像最近爆发的新冠肺炎疫情，病毒的变异是迅速而且变幻莫测的，传统的抗体提取在研究者们的探索之下都已失败而告终。那么我们是否能够切换视角，从量子力学的角度切入，辅助进行相关药物的设计呢？由于此部分涉及到保密问题，我并没有在网上找到更多的相关信息，因此不好做其他评论。

**PPT10**

看完了量子力学在生物医学方面的应用，我们再来看看他与化学的爱恨情仇。

说到化学，我想他本身就是和物理密不可分，情同一家的，而化学现象的本质，也大都来自于微粒之间奇妙的作用。首先把量子力学应用到化学上的人是海特勒和伦敦。他们在1927年用量子力学研究氢分子形成的化学行为 ,不久便建立了不同自旋的电子配对(Pa i r e d ) 在一起形成正常键的观念。这也可以说是量子力学在化学方面应用的开山之作。

**PPT11**

化学作为一门理论性的学科，要想融汇另外一种理论，无非有两个方面：一方面是用量子力学简单的术语 、观念,或计算方法来解释一些已由实验发现的现象,另一方面是用量子理论 的推理和计算去预 测一些我们还不知道的现象,并以理论去寻求或设计新的实验以发现许多未知的现象 。

现在，让我们根据一些已有的发现和研究，来看看量子力学在这两个方面的应用。

**PPT12**

量子力学在材料科学中的应用非常广泛。

首先，量子力学可以用于研究材料的电子结构和物理性质，预测材料的性能和稳定性。在材料科学中，量子力学被用来解释和预测材料的性质，对于研究、设计和开发新材料非常有帮助。例如，量子力学可以计算材料的能带结构、能级分布等，这些信息可以帮助科学家了解材料的导电性、光学性质等，并指导新材料的设计和合成。

其次，量子力学在材料模拟和设计中也有重要应用。通过量子力学模拟，可以计算出材料的性能和特性，与材料实验相比，模拟可以为科学家提供反复测试材料的机会，使研究更加深入。例如，在超导材料的设计和开发中，通过量子力学模拟和计算，科学家可以找到相对于超导材料内禀电子对之间的相互作用，这有助于开发具有更高电渗透能力的新材料。

此外，量子力学还可以用于研究材料的磁性计算。例如，通过计算材料的自旋磁矩、磁相互作用等参数，科学家可以预测材料的磁性质，并优化材料的磁性能。

总之，量子力学在材料科学中的应用可以帮助科学家更好地理解材料的性质和行为，预测材料的性能和稳定性，并指导新材料的设计和合成，对于推动材料科学的发展具有重要意义。

首先，我们先来说一说量子力学和化学键的故事。

许多有机分子都相当稳定 , 它们的晶体结构也很有规律，因此易于研究它们的几何结构。 实验上我们能很清楚地知道许多有机分子的键角和键长。我来谈谈键角。现在我们都很熟悉 1931年鲍林( P a u l i n g ) 提出的轨道杂化的观念 ,但许多人并不清楚当初这观念是如何建立起来的,碳原子基态的电子结构是1S22S22P2, 有二个电子分别单独占有二个2p轨道 (2Px、2Py、2Pz之中的任何二个轨道),所以碳原子应该具有二价。但许多有机化合物中, 碳原子都形成四个键而表现为四价。范福里克( V a n v l e c k)等人当时注意到,碳原子的三个2P轨道，其中两个被两个电子分别占有，外部尚有一空的2P轨道,如果2S轨道中的一个电子被激发到那个空的2P轨道,那么便有四个电子分别单独占有四个轨道,可形成四个键,解释了碳是四价的现象。但实验发现甲烷的单取代物(例如氯代甲烷 C H 3 C l只有一种,因此碳原子的四个成键轨道应该是等同的。为了解释这一实验事实, 鲍林提出了杂化轨道观 念,也就是碳原子的一个2S轨道和三个2P轨道混合,形成四个等价的SP3杂化轨道,而每个杂化的SP3轨道都有一个电子,因此可形成四个等同的共价键,而且这四个杂化轨道是从四面体中心指向顶角的四个方向的,这便很圆满地解释了四面体键角的事实。鲍时还指出碳原 子的2S和2P轨道还可以有SP型和SP2型的杂化。杂化轨通常有较好的重叠能力,因此可得到额外的重叠能量,这额外的重叠能量可以补偿将S2电子激发到2P轨道所消耗的能量,所 以碳原子以四价与其它元素形成化合物的现象比以二价(例如在 C B r 2中)化合更常见,虽然在 CBr2 中碳原子的电子并不要从2S轨道跃迁到2P轨道。杂化原子轨道的方向性很强, 根据最大重叠原理,应当产生强的键,那么两个杂化原子轨道应沿二核间直线联线方向重叠而形成直键.一般链状的分子都能达到最大重叠,但在环状分子如环丙烷要形成直的 C一 C键,需要二个杂化轨道指的方向成 60°夹角，但是任何两个真正的杂化轨道彼此的夹角都不会小于90°（二个纯P轨道彼此成90°）如要增加重叠能力,那么便要与s轨道杂化,也就是要增加杂化轨道的s轨道特性,那么会使夹角更加张开,而使轨道间重叠不能沿两核间连 线直接相对地重叠。1949年,M o f it t 证明在环丙烷中当碳原子与碳原子之间( C 一C ) 杂化轨道几乎成100°时,会重叠成如图c那样的弯键,而重叠部分不在二原子核连接线上,因此HCH夹角也是张开的(比60大得多),这完全与实验结果相符。弯键的观念是量子力学的一个重要成就 它解释了胁变能量(strain energy)的问题,因为弯键代表较少的轨道重叠, 因此键势能量也少,所以键较不稳定,因此摒弃了早年Baeyer对胁变能量所作的定性解释。 为了证实弯键存在,需要很精确地由X 射线分析得到的电子密度结果。如果键是直的,那么在二核联线上应有密集的电荷分布,如果是弯键的话,密集的电荷便应分布在连接三个碳原子核所形成的三角形的外面。而 H i r s h f e l d和 H a r t m a n 用X射线很小心地分析 C 3 H 3( C N ) 3的电荷分布,证实了M o f f i t t 的弯键理论 ( 见 图 2 ) 。

弯键理论的证实可以说是量子力学在诞生初期的一次大显神通，他仿佛打开了新世界的大门，让不少化学研究者心向往之，而不少物理学家也借助量子力学这一神兵利器证实了不少的化学问题，比如我们耳熟能详的泡利不相容原理等等。

**PPT13**

量子力学与化学键之间有着密切的关系。化学键的形成和破坏是由原子之间的相互作用决定的，而这种相互作用又受到量子力学的影响。

在量子力学中，原子中的电子按照一定的能级分布，而这些能级又决定了原子间电子的交换和排布。当两个原子相互靠近时，它们之间的电子会相互影响，形成一种新的能级分布，这种分布又决定了化学键的类型和强度。

此外，量子力学还解释了化学键的长度、角度和强度。例如，化学家们通常使用VB（Valence Bond）理论或MO（Molecular Orbital）理论来描述化学键的形成。VB理论主要关注电子的共享和转移，而MO理论则更注重电子的排布和轨道重叠。这些理论都是基于量子力学的基本原理，能够准确地预测化学键的性质。

因此，可以说量子力学是化学键研究的理论基础，它为我们提供了深入理解原子间相互作用和化学反应机制的工具。

**PPT14**

那么接下来，我们再来看看量子力学在化学领域预知未知事实的方面，做出过哪些贡献。

量子力学用在化学上可以进行若干预测。由预测可提示新的实验 ,可引入新的观念,也可以解决一些悬而未决的争论。下面我们一起来看看CH2这个有机化学中最常见的基团的神秘面纱是如何一步步地被人们所揭开的。

这一类基因为寿命太短,不容易用普通实验技术来测量。 H e r z - b e r g 曾用一些实验测量CH2基,研究它们对紫外线的吸收。他花了几年时间才证实CH2可被测到,但仍不能决定测到CH2是单态还是三重态。这里有一个小知识点，就是单态和三重态的定义，我们举一个简单的例子来说明这两个概念，如是单态,像H20分子,它的键角应为105°;但如果是三重态,这分子将是直线形的。动力学的研究发现在不同条件下,单态和三重态都是可能形成的,而且这两个态具有非常不同的化学反应性。如果我们要了解这些不同,一定要知道哪一个是基态,其键角是多少? 虽然关于分子几何形状的一些较基本的讨论,可用 A.D.Walsh等人的法则。但在CH2的情况下,因总共只有八个电子,用大型电子计算机作精确的波函数和能量计算还不太难。通过精确计算有效地解决了这个问题。计算结果的确证明CH2有二个态(单态及三重态)。但二个态的能量很接近。三重态是基态,但不完全是直线形而只是接近于直线形,后来电子顺磁共振的实验果然证明是如此。

不过目前精确计算所作预测只能用在较小的分子上,对较大的分子精确计算还有很多困难。但是通过这一例子，我们可以很明显地感受到，用量子物理得到的一些结论去测定一些其他学科较难解决的问题，往往有更加奇妙的功效。

。

,

。

**PPT15**

谈完了生物化学，现在终于来到了量子力学重头戏：计算机通信，相信这也是量子物理在现实应用中最为广泛的一个领域了。

量子力学和通信技术像一对恩爱的情侣，他们举案齐眉，互为补充，下面，怀着这份八卦的心，让我们一起来看看，这对小情人的爱情故事。

**PPT17**

一、量子力学与信息技术的前世缘

量子力学的一个重要应用是核能。早在原子弹研制过程中，所需要的大量计算靠人力已无法完成，后来在冯·诺依曼（John von Neumann，1903—1957）设计的架构下，诞生了第一台现代通用计算机。除此之外，互联网最早的雏形在某种意义上也与量子力学息息相关。量子力学基础研究的一个重要使命是探索宇宙的起源并建立大统一的理论，因此科学家们建立了大型的加速器来研究微观粒子的特性（比如在瑞士的欧洲核子中心，CERN）。最初，是通过越洋电话将数据传给分散在世界各地的科学家进行研究，这就构成了互联网的雏形，后来在美国国防部高级研究计划局（DARPA）的支持下逐渐形成了今天的互联网。 时光流逝，当代信息技术的发展正面临着两大难题：计算能力和安全性遭遇 瓶颈。大数据时代，人类对计算能力的需求与日俱增，但目前计算能力仍十分有限；为保证信息的安全，可采取加密技术，但随着计算能力的提升和对算法研究的深入，依赖于计算复杂度的传统加密算法面临着越来越严重的被破解风险。量子力学在应用过程中，除了催生现代信息技术，也为解决上述难题，提供了较好的路径。

**PPT18**

1. 量子信息携起手，共作比翼双飞鸟

所谓量子，是构成物质的最基本单元，也是能量的最基本携带者，具有不可分割性。早期科学家对所谓“量子纠缠”的奇怪现象进行检验，逐渐发展了可以对单个量子的状态进行人工制备、对多个量子间相互作用进行主动调控的技术，继而诞生了新的学科——量子信息。量子信息科技一方面可实现原理上无条件安全的信息传输；同时也可构建新一代的计算机，带来计算能力上的飞跃，突破信息和物质科学技术的经典极限。量子通信（量子密钥分发）克服了经典加密技术的安全隐患，是当前唯一被严格证明的无条件安全通信方式。例如甲、乙二人要进行安全通信，甲可以发出一个个的光子，通过它们的极化状态来加载密钥信息。如果有窃听行为存在的话，第一，窃听者不能把光子分成两半，截取“半个光子”的信息，因为光子不可分割；第二，窃听者不能复制信息，因为未知的量子状态不可被精确克隆；第

三，窃听者把光子截获，乙收不到信息，也就不存在窃听。无论怎样，根据量子力学原理，窃听都可以被发现；一旦窃听被发现，原有密钥立即作废，双方再从网络中另选一条安全的线路重新生成密钥。总之，甲就可以把没有被窃听的密钥传送过去，利用安全的密钥进行一次一密、完全随机的加密。所以,利用量子不可克隆定理和不可分割的特性可实现安全量子密钥分发，实现不可破译的保密通信。量子密钥的相关应用模式主要有两个方面，一方面可用于身份认证，因为量子密钥产生的速率远大于功率密码产生的速率，可在一次一密的情况下对数据摘要加密，实现数据认证，可提高安全性，减少数据延时。当然，量子密钥不仅可

用于验证数据的有效性，还可验证用户服务器身份的合法性；另一方面可用于通信的保护，即确保信息的安全传输。在密钥的分配、管理的基础上，对明文进行数据加密，通过现有的经典通信网络进行密文传输，其安全性超过目前的专网。利用量子叠加原理可实现超快的量子并行计算。比如利用万亿次经典计算机分解300位的大数需要15万年，但是利用万亿次量子计算机，只需要1秒。同理，在大数据和人工智能领域，求解一个亿亿亿变量的方程组

, 利用目前最快的亿亿次计算机大概需要100年左右，但是如果利用万亿次的量子计算机只需要0.01 秒。从这个角度来讲，量子计算在未来有很好的发展前景，且应用十分广泛，可

解决大规模的计算机难题，用于破解经典密码、气象预报、药物设计、金融分析、石油勘探等方面。还可通过量子模拟的手段来揭示惯性约束核聚变、高温超导、量子霍尔效应等新能源、新材料的机制，这种量子模拟机，或者称作专用量子计算机，就物理学家来讲可能更感兴趣。专用量子计算机也许在5~10年内就会有较好的结果产生，用来揭示一些复杂物理系统的规律，而通用的量子计算大概还需更长的时日。

**PPT19**

1. 量子信息一条心，共克前行路上敌

关于量子通信技术，国际上有共同的发展路线图：一是通过光纤实现城域量子通信网络；二是通过中继器连接实现城际量子通信网络，把很多城市连接起来；如果要把信息高效地发射到驻外机构或者国外，或者更加遥远的地点之间的量子通信，则需要第三个技术，通过卫星中转实现远距离量子通信。当把这三项技术结合起来，就可以构建广域的量子通信网络，从而保证各个节点之间信息安全传输。目前，我国量子通信技术与应用水平已处于国际领先水平，城域量子通信网络技术已经成熟，并在国家信息安全领域得到初步应用。2016年8月16日，我国自主研制的世界首颗量子科学实验卫星“墨子号”成功发射，在国际上首次

实现高速的星地量子通信，从而连接地面光纤量子通信网络，实现广域的量子通信。另一方面，在国家发改委的支持下，国际上首条千公里级远距离光纤量子通信骨干网络“京沪干线”也在2016年年底全线开通并投入运行，建成大尺度量子通信技术验证、应用研究和应用示范平台。结合量子卫星和京沪干线，将初步构建我国天地一体的广域量子通信基础设施。当然，若要实现高效的全球化量子通信，还要进一步跨越系列难关。由于单颗卫星无法直接覆盖全球，实现全球化量子通信还需要卫星组网，这就不可避免地有星地通道暴露在太阳光的强烈背景下。量子通信的传输载体是单光子，能量是非常微弱的，而太阳光含有大量的光子，每次探测能进入到探测器内部的大概有1018个光子。这相当于要从1018个光子中捕捉到其中想要的那一个，技术难度可想而知。这需要选择在太阳辐射相对较弱的波段进行量子通信，同时还要发展对应波长的频率转换技术和高效的单光子探测技术等。另外，卫星组网还需要卫星之间的量子通信，由于卫星间的距离往往比较远，还需进一步提升跟瞄的精度。

总之，经过10年左右努力，希望形成天地一体化的全球量子通信基础设施、完整的量子通信产业链和下一代国家主权信息安全生态系统，在此基础上构建基于量子通信安全保障的未来互联网（“量子互联网”）。另一方面，通过10 到15年努力，量子计算机对于某些特定问题的计算能力可远远超过目前世界最快的“太湖之光”超级计算机，而且耗电量只是“太湖之光”的几万分之一或者更低。

引用约翰·惠勒的话：“过去100年间量子力学给人类带来了如此之多的重 要发现和应用，有理由相信在未来100年间它还会给我们带来更多激动人心的惊喜。”我们对未来充满希望。