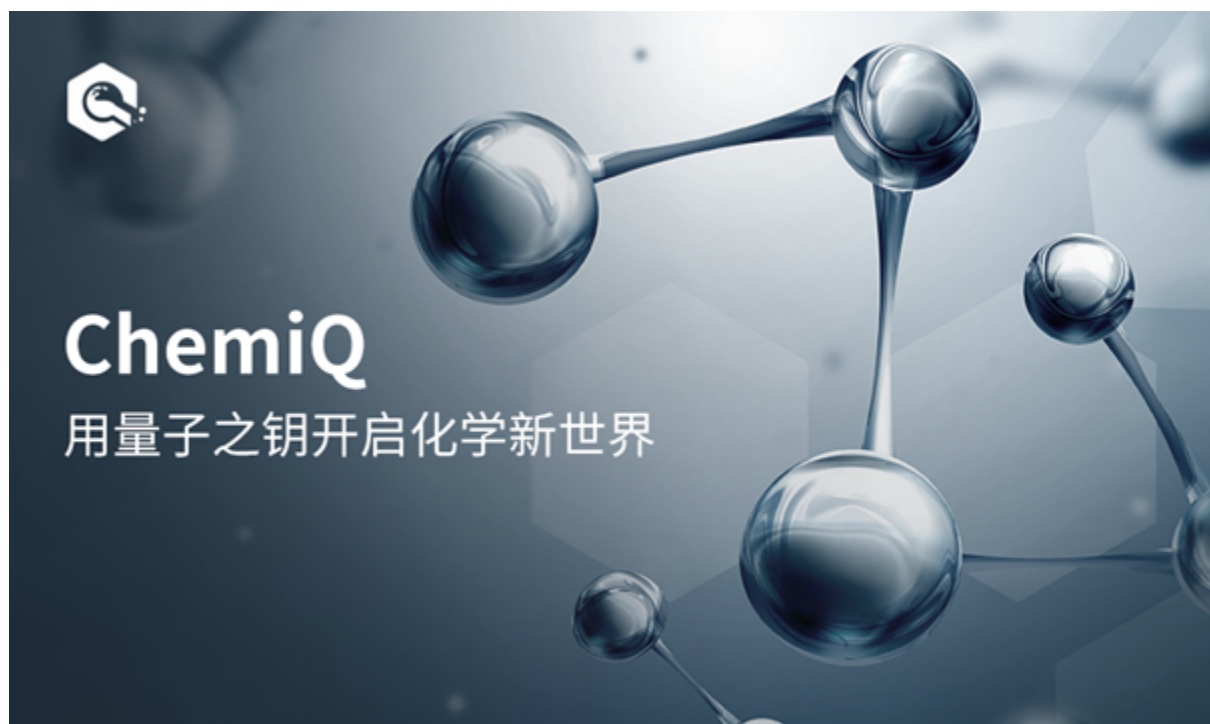




ChemiQ V2.4.0

使用教程及参考手册

本源量子计算科技（合肥）股份有限公司



目录

| | |
|-------------------|-----------|
| 简介 | 1 |
| 第一部分 安装和概述 | 3 |
| 第一章 安装 | 3 |
| 第二章 概况 | 4 |
| 2.1 开始和退出 | 4 |
| 2.2 试用和激活 | 4 |
| 2.3 概况和操作 | 6 |
| 2.3.1 菜单栏 | 6 |
| 2.3.2 工具栏 | 7 |
| 2.3.3 主界面 | 7 |
| 2.3.4 鼠标/键盘快捷操作 | 7 |
| 2.3.5 图标及解释 | 9 |
| 2.3.6 首选项 | 9 |
| 2.3.7 监控和终止计算 | 10 |
| 第二部分 模块介绍 | 11 |
| 第三章 文件 (F) | 11 |
| 第四章 任务 (T) | 11 |
| 第五章 设置 (S) | 13 |
| 5.1 分子模型 | 13 |
| 5.2 参数配置 | 14 |
| 5.2.1 计算类型 | 14 |
| 5.2.2 基组 | 16 |
| 5.2.3 电荷 | 16 |
| 5.2.4 自旋多重度 | 17 |
| 5.2.5 映射 | 17 |
| 5.2.6 拟设 | 17 |
| 5.2.7 优化器 | 21 |
| 5.3 开始运行 | 22 |
| 5.4 主题设置 | 22 |
| 第六章 视图 (V) | 23 |

| | |
|-----------------------|----|
| 第七章 结果 (R) | 23 |
| 第八章 窗口 (W) | 24 |
| 第九章 帮助 (H) | 26 |
| 第三部分 计算操作流程 | 27 |
| 第十章 创建项目 | 27 |
| 第十一章 新建任务 | 27 |
| 第十二章 分子建模 | 28 |
| 12.1 添加原子 | 28 |
| 12.2 分子信息 | 28 |
| 12.3 旋转、缩放和平移分子 | 30 |
| 12.4 编辑坐标列表 | 30 |
| 12.5 删除原子 | 30 |
| 12.6 快捷操作 | 30 |
| 12.7 导出分子模型 | 30 |
| 12.8 导入分子模型 | 31 |
| 第十三章 参数配置 | 31 |
| 第十四章 开始计算 | 32 |
| 第十五章 结果展示 | 32 |
| 15.1 计算结果复用 | 33 |
| 15.2 计算任务复用 | 33 |
| 第十六章 集群计算 | 34 |
| 第十七章 真实芯片计算 | 34 |
| 附录 | 37 |
| 附录 A ChemiQ V2.3.0 新增 | 37 |
| 附录 B ChemiQ V2.4.0 新增 | 37 |

简介

分子力学 (Molecular Mechanics, MM) 和量子化学 (Quantum Chemistry, QC) 一直以来是提供分子结构与性质的有力计算方法，随着经典计算机的飞速发展，对硬件条件依赖较少的分子力学已不再成为主流，而以电子为研究对象的量子化学逐渐被化学家广泛使用。

量子化学利用量子力学和统计力学为核心的第一性原理 (*ab initio*) 求解复杂体系的多电子波函数。尽管经典的计算化学模拟极大地帮助我们理解化学系统及其过程，但是求解薛定谔方程的计算成本随着原子数增加而迅速增长，而量子比特的叠加性使量子计算机具有固有的并行属性，因此量子模拟通常比经典模拟具有**指数优势**（也称为**量子霸权**）。量子计算机强大的计算能力不断突破，给理论化学家有了新的启发，即解决经典计算化学软件存在的无法突破的**指数墙**难题。

ChemiQ 是在量子计算机或虚拟机上模拟化学分子结构和性质的仿真软件——也是全球首款使用量子算法模拟的仿真软件——在接入量子计算机后计算速度有望呈指数增长。ChemiQ 利用 Jordan-Wigner, Parity 等方法将二次量子化的 Fermion 的 Hamiltonian 算符映射 (mapping) 成 Qubit 的 Hamiltonian 算符 (量子计算机识别的算符)，算符间的转换是量子计算模拟化学过程的第一步，不同的转化方法对应着不同的 Qubit 信息，研究出所转化的算符少的 mapping，相应的计算少，可大大简化计算；使用 Unitary Coupled Cluster (简称 UCC) 等不同的**假设**构造量子电路，分别代表不同的电路模型，所包含的参数数目和线路深度也不尽相同，构造出参数少、线路浅的线路假设是复杂的化学过程得到有效模拟的关键；再结合量子相位估计 (QPE)，变分量子本征求解 (VQE) 算法，或量子虚时演化 (QITE) 算法模拟分子哈密顿量的期望值，进一步预测分子性质。这些算法不仅能保证量子态的相干性，其计算结果还能达到化学精度，在可预见的未来，有着极大的应用前景和优势。

ChemiQ 可以计算分子的**单点能、势能曲线和动力学模拟**，而势能面扫描可以基于不同变量 (**距离、角度、二面角**)，对于简单的基元反应，势能面扫描可以为过渡态的寻找提供方法，例如典型 S_N2 反应中基于距离的势能面扫描可以找到曲线上的最高能量，从而找到该反应的过渡态的近似构型。**分子动力学模拟** (Molecular Dynamics, MD)，MD 可以研究溶剂化动力学 (Solvation Dynamics)，振动弛豫 (vibrational relaxation)，反应动力学等。计算后端方面，ChemiQ 目前支持本地模式，集群模式以及真实量子芯片模式，可以根据用户需求进行定制化的集群部署及量子比特芯片的资源调度。

ChemiQ V2.4.0 对比上一版本主要对下面的部分进行更新：增加真实量子芯片计算后端，从而支持使用真实超导量子计算机计算分子相关性质；增加元素周期表中前 111 号元素和 18 种键型的分子模型搭建；分子建模更改键长、角度、二面角功能；自定义基组功能；导入和导出 .chemiq 配置文件和 .chemiqout 计算结果文件；客户端国际版页面的支持等。

ChemiQ V2.4.0 使用手册包括以下章节：

- 第一部分 (第 1-2 章): 介绍软件的安装和一些简单的概述;
- 第二部分 (第 3-9 章): 对软件的七大模块进行详细的介绍;
- 第三部分 (第 10-17 章): 介绍应用软件的操作流程;

The image displays a software interface for quantum chemistry calculations, divided into two main sections. On the left is a '参数配置' (Parameter Configuration) window, and on the right is a 3D ball-and-stick model of a molecule.

参数配置 (Parameter Configuration) Window:

- 基础配置 (Basic Configuration):** Includes '预设类型' (Presets) set to '自定义' (Custom), '切片参数' (Slicing Parameters) set to 1, '空间参数' (Spatial Parameters) set to '活性空间' (Active Space), '活性轨道' (Active Orbitals) set to 2, and '活性电子' (Active Electrons) set to 2.
- 映射配置 (Mapping Configuration):** A toolbar with buttons for X, Y, Z, H, RX, RY, RZ, CNOT, CZ, and a red menu icon.
- 预设配置 (Preset Configuration):** A quantum circuit diagram with four qubits (q[0] to q[3]) starting in the $|0\rangle$ state. The circuit consists of 11 gates:
 - Gate 1: X on q[0]
 - Gate 2: CZ between q[0] and q[2]
 - Gate 3: RY on q[2]
 - Gate 4: CNOT from q[2] to q[0]
 - Gate 5: RY on q[0]
 - Gate 6: H on q[1]
 - Gate 7: CZ between q[0] and q[1]
 - Gate 8: CZ between q[0] and q[2]
 - Gate 9: CNOT from q[0] to q[3]
 - Gate 10: H on q[0]
 - Gate 11: RZ on q[3]
- 优化器配置 (Optimizer Configuration):** This section is currently empty.

At the bottom right of the window are '取消' (Cancel) and '确定' (OK) buttons.

3D Molecular Model: A ball-and-stick model of a complex organic molecule, likely a protein or a large organic ligand, with atoms represented by different colors (white for hydrogen, black for carbon, red for oxygen, blue for nitrogen, yellow for sulfur, and green for phosphorus).

第一部分 安装和概述

第一章 安装

在**本源量子官网**点击下载 ChemiQ.exe，或者打开打包优盘下载 ChemiQ.exe，根据向导安装。

ChemiQ

ChemiQ依托本源量子自主研制的QPanda量子软件开发包，利用量子叠加与纠缠的天然优势，使用真实或模拟量子计算机来计算分子能量和结构、计算化学反应、模拟势能曲线、模拟动力学轨迹等。未来在加速化学合成、药物研发、材料设计、能源开发等方面具备广泛应用前景。

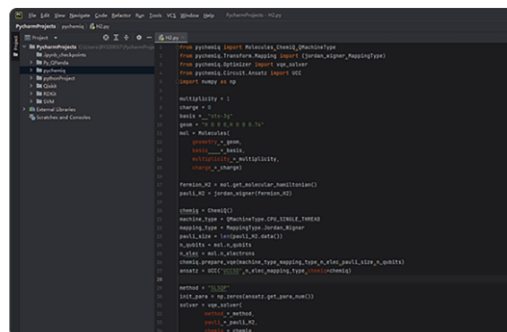


图 1.1: 下载 ChemiQ

1. 点击“我同意”，开始安装；
2. 下图为安装成功软件默认启动图片：

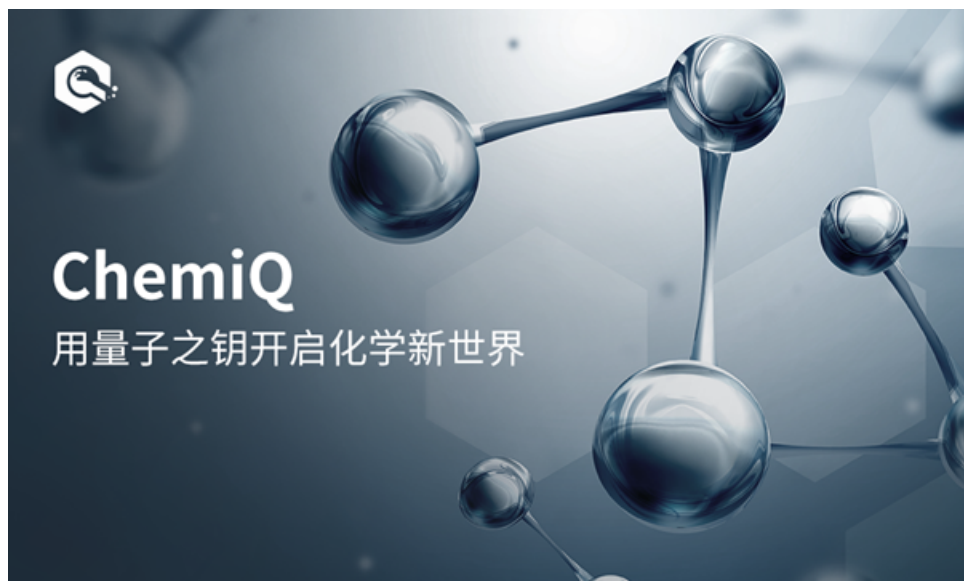


图 1.2: ChemiQ 启动页

第二章 概况

ChemiQ 是一个在量子计算机或虚拟机上进行化学模拟的仿真软件，能够计算分子单点能、势能曲线和动力学模拟，并可视化展示和分析计算结果。本节旨在介绍软件的整体概况，使用户对这一款量子计算化学软件有全局性的了解。

ChemiQ 的功能特点主要为：

1. 能够可视化构建分子模型，且与主流化学软件分子构型配置文件兼容（详细操作见第5.1节分子模型），例如 ChemOffice、Gaussian 等；
2. 提供丰富的参数配置，能够灵活布置计算任务，并且软件操作复杂度低，尤其是量子线路部分。（详细见第5.2节参数配置）；
3. 计算结果通过可视化界面实时更新和展示计算列表和计算曲线（详细见第七章结果模块），以便及时调整计算任务；
4. 支持不同终端的配置文件和结果文件互相读取。客户端计算配置文件.chemiq 和结果文件.chemiqout 可以与 pyChemiQ 和 ChemiQ 后端互相读取；（详细见第四章任务模块）
5. 支持元素周期表中前 111 号元素和 18 种键型的分子模型搭建；
6. 支持构建自定义拟设量子线路；（详细见第5.2.6章节拟设配置）
7. 支持本地模式、集群模式、真实芯片计算。（详细见第十六、十七章）

2.1 开始和退出

Windows 下启动 ChemiQ，单击“开始”按钮，然后单击所有程序，最后单击 ChemiQ(或双击桌面上的 ChemiQ 图标)。要退出 ChemiQ，请从 Windows 上的“文件”菜单中选择“退出”，或单击 ChemiQ 界面右上角的“关闭”按钮。

2.2 试用和激活

试用：从本源量子官网下载安装 ChemiQ 软件后，可以免费试用 7 天。

激活认证：试用期结束后，需要申请序列号进行激活认证，认证成功后，可以继续试用。（申请序列号 → 填写申请信息 → 输入序列号）

也可以在菜单栏-帮助的下拉列表中查看激活状态，点击帮助-序列号弹出“序列号信息窗口”，输入序列号，完成软件激活认证。

本源量子 ChemiQ 采用联网识别，设备需要联网进行计算和激活认证，请确保网络连接顺畅。序列号基于特定的硬件信息使用 RSA 非对称的加密方式生成，安全可靠。



图 2.1: 激活认证 ChemiQ



2.3 概况和操作

ChemiQ 分为三部分：**菜单栏**、**工具栏**、**主界面**，程序功能可以从菜单栏或菜单栏下方的工具栏访问，计算任务可以从主界面查看和操作。还有一些**鼠标**、**键盘的快捷操作**等，以下将进行详细的介绍。

2.3.1 菜单栏

当打开软件跳转到下图“过渡界面”后可选择“创建项目”、“打开本地”和“快速进入”，如图2.3所示：



图 2.3: ChemiQ 启动过渡页

主界面菜单栏包括：**文件 (F)**、**任务 (T)**、**设置 (S)**、**视图 (V)**、**结果 (R)**、**窗口 (W)** 与**帮助 (H)** 七个功能模块，菜单栏可以作为下拉菜单访问，菜单栏的七大模块所包括主要功能如图2.4所示：

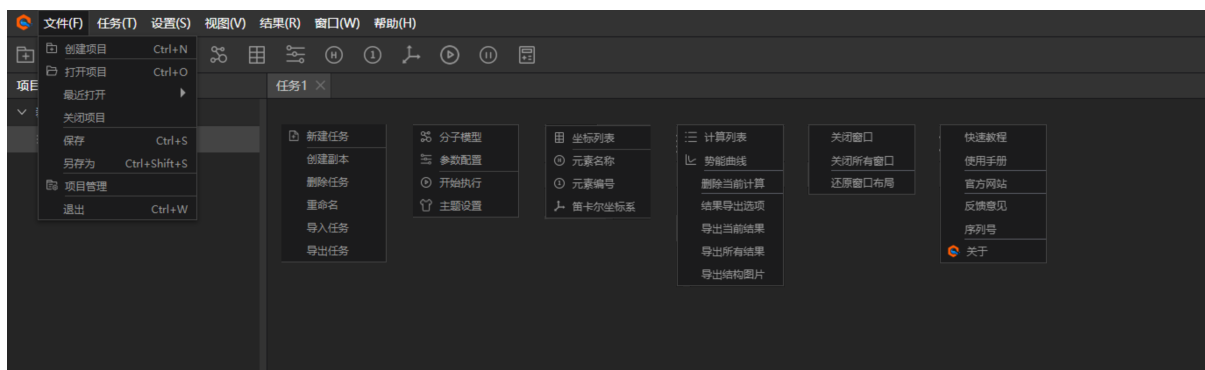


图 2.4: ChemiQ 菜单栏功能一览

文件 (F) 支持对于项目的管理和操作功能；**任务 (T)** 支持对每一个计算任务新建、删除、导入导出等操作；**设置 (S)** 作为核心模块包括分子模型、参数配置、开始执行、主题设置；**视图 (V)** 包括坐标列表、元素名称、元素编号和笛卡尔坐标系，用户在建模时候可自由选择；**结果 (R)** 支持计算后对结果的可视化显示和分析以及导出；**窗口 (W)** 模块支持关闭栏目的窗口和还原窗口布局等；**帮助 (H)** 包括一些教程和手册帮助用户快速使用软件，还有官方网站以及反馈意见等，在使用中如有任何建议和疑问，欢迎您联系我们。

2.3.2 工具栏

工具栏位于菜单栏目（七大模块）下方，如图2.5所示；工具栏中显示菜单栏中一些常用功能的快捷操作，从左到右依次是：**创建项目**、**打开项目**、**保存**、**项目管理**、**新建任务**、**分子模型**、**坐标列表**、**参数配置**、**元素名称**、**元素编号**、**笛卡尔坐标系**、**开始计算**、**暂停计算**、**重新计算**，方便高效布置计算任务。

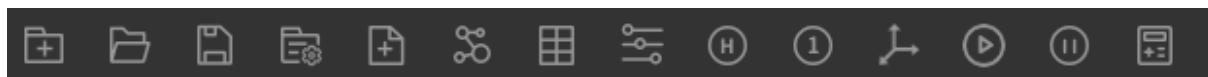




图 2.5: ChemiQ 工具栏功能一览

2.3.3 主界面

主界面包括**项目资源**、**项目/任务详情**、**分子模型**、**计算结果**，如图2.6所示：

项目资源：该部分充当资源管理器作用，管理项目下的所有任务，支持在具体项目的下拉栏中显示对应的任务，右键可以对任务进行快捷操作，目前一个项目下面最多管理 5 个计算任务；**项目/任务详情**：该部分展示项目或者任务的详细信息；**分子模型**：该模块用来显示分子构型或者编辑分子模型的画布界面。从版本 V2.3.0 起，ChemiQ 支持分屏显示计算任务，方便查看计算细节和对比结算结果。所需执行的操作是，同时打开任务 1 和任务 2 后，选中上方任务栏拖拽至画布右侧即可；**计算结果**：支持任务结果的显示，包括以文本或曲线的形式查看，同时显示计算节点的进度或状态：“xx%”表示计算进度，“√”表示计算成功，“!”表示计算失败。计算结束后，可以通过计算列表 () 和计算曲线 () 切换计算结果。前者是以列表形式逐个展示当前任务各个节点的计算结果（单点能和动力学模拟只有一个计算节点），后者是以当前任务所有节点绘制曲线的形式展示计算结果。

2.3.4 鼠标/键盘快捷操作

以下是一些鼠标/键盘的快捷操作：

用户建模过程最重要是灵活性，ChemiQ 从版本 V2.3.0 起支持快捷建模，可方便用户高效率完成分子建模任务。在分子模型界面支持图2.8的快捷操作：

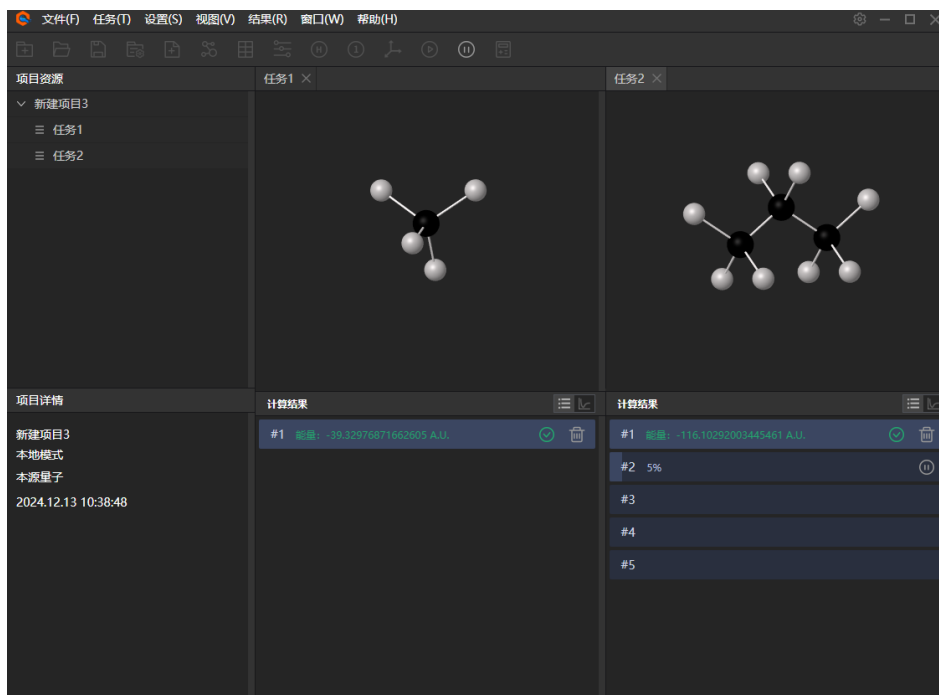


图 2.6: ChemiQ 主界面以及分屏

| | 键盘 | 鼠标 | 功能 |
|------|--------------|------|--------|
| 文件模块 | Ctrl+N | 无 | 创建项目 |
| | Ctrl+O | 无 | 打开项目 |
| | Ctrl+S | 无 | 保存 |
| | Ctrl+Shift+S | 无 | 另存为 |
| | Ctrl+W | 无 | 退出 |
| 分子模型 | Ctrl+X | 无 | 剪切 |
| | Ctrl+C | 无 | 复制 |
| | Ctrl+V | 无 | 粘贴 |
| | 无 | 鼠标左键 | 分子整体旋转 |
| | 无 | 鼠标右键 | 分子整体平移 |

图 2.7: ChemiQ 鼠标/键盘快捷操作



图 2.8: ChemiQ 建模快捷操作

当用户点击“设置-分子模型”后主界面侧边栏目会有如上建模快捷键：**元素列表**支持选择前 111 位元素和 18 种键型的分子模型搭建；**框架模型**支持选择适当的框架；**一键加氢**支持对于分子中所有单键加氢；**断键**可断任意两个原子间的键；**加键**可添加任意两个原子的键型（单键、虚键、单虚键、双键和三键）；**调整键长**功能可以调节任意两个原子间的距离；**调整角度**功能可以调节任意三个原子间的角度；**调整二面角**功能可以调节任意四个原子间的二面角。选中功能后，分别点击两、三、四个原子进行调整，默认调整点击的最后一个原子的坐标。**撤销和重做**可记忆用户操作随意撤销和前进；**导入和导出**支持导出可供其他计算化学软件互通的输入输出格式（gjf、pdb）；**删除**支持删除分子构型中的原子和对应的键。如果从元素列表中搭建分子模型，删除功能是删除整个分子模型；如果从框架模型中搭建分子模型，删除功能是删除整个基团。如果是从框架模型中搭建的，删除功能是删除单个原子及对应的键。

2.3.5 图标及解释

图2.9是本软件所有的图标和解释：



图 2.9: ChemiQ 所有图标一览

2.3.6 首选项

在 ChemiQ V2.4.0 的首选项中可以配置全局项目路径、更改项目备份路径，也可以在此处设置软件语言。如图2.10箭头为首选项配置图标。

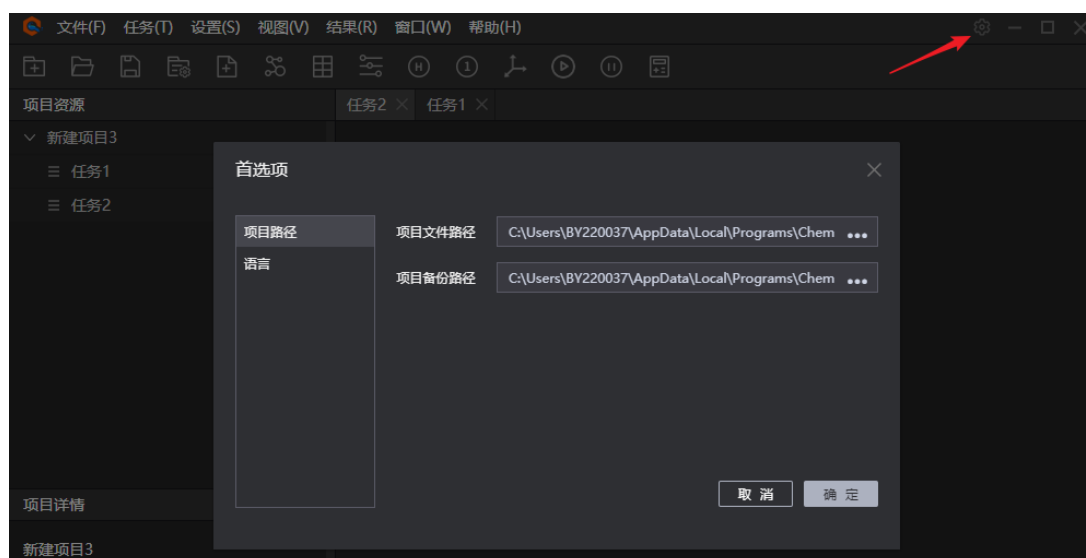



图 2.10: ChemiQ 菜单栏中的首选项配置详情




2.3.7 监控和终止计算

工具栏图标  可控制任务的开始、暂停、重新计算，支持对单个任务的独立操作例如删除，暂停、重新计算等操作。

第二部分 模块介绍

进入到手册的第二部分——模块介绍，这一部分介绍了七大模块的具体内容。**文件 (F)** 学习基本的项目操作；**任务 (T)** 了解任务间的管理；**设置 (S)** 学习计算操作；**视图 (V)** 学习操作分子模型显示；**窗口 (W)** 学习操作布局；**帮助 (H)** 了解软件更全面，在使用 ChemiQ 软件前请仔细进行本部分的学习。总之，经过这一部分的学习，我相信用户将会操作简单的计算，让我们正式开启量子计算化学之旅吧！

第三章 文件 (F)

如图3.1所示，作为软件的第一模块——**文件 (F)**，包括：创建项目、打开项目、最近打开、关闭项目、保存、另存为、项目管理和退出。**创建项目**（工具栏中的“”）支持建立新的项目；**打开项目**（工具栏中的“”）支持跳转本地打开项目；**最近打开**如图3.1所示显示最近打开的项目并随意切换；**关闭项目**返回启动过渡页；**保存**默认保存当前操作；**另存为**跳转至另存的本地位置，并下一次直接通过“打开项目”打开上次的保存路径；**项目管理**（工具栏中的“”）可对本地的项目导入和编辑等；**退出**直接退出软件。

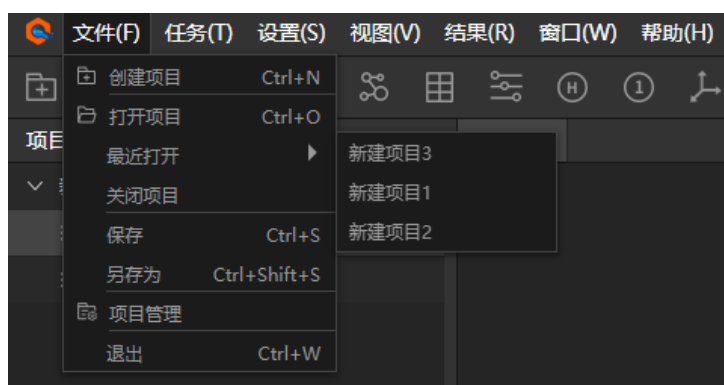







图 3.1: ChemiQ 菜单栏中的文件模块

如图3.2所示，**项目管理**可以对自己已经创建的项目随意切换并在选中后点击加载按钮（图标“”）切换至选中的项目中；另外快捷按钮支持导入本软件识别的项目（图标“”）、导出到任何本地位置的项目文件（图标“”）和编辑项目信息（图标“”）以及删除项目（图标“”）。

第四章 任务 (T)

任务 (T) 模块允许您对任务进行新建和删除，支持新建副本以及对选中的任务重命名等便捷操作。其中，**创建任务**为创建无分子模型的新任务；**创建副本**为复制选中任务

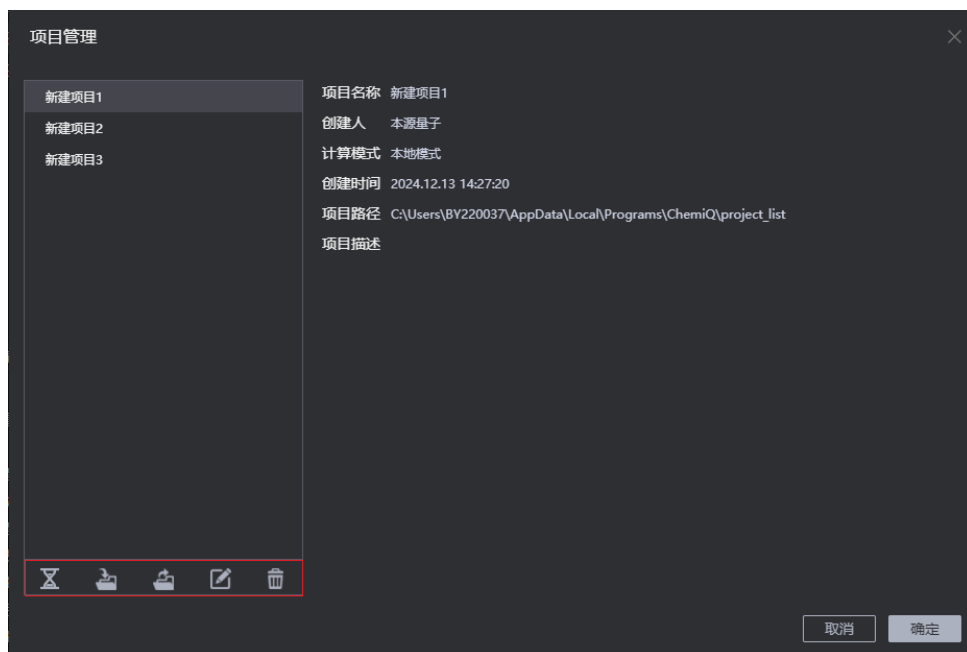


图 3.2: ChemiQ 项目管理

的所有配置信息，但不复制结果；**删除任务**为删除项目资源管理器中的原始文件，默认彻底删除。也可以在这里导入或导出项目下选中的任务，若没有选中，默认对最后一个任务进行相应的操作。其中**导入任务**支持在当前项目下导入格式为.chemiq 和.chemiqout 的任务。其中.chemiq 格式的文件包含计算任务的配置信息，包括后端设置、分子坐标信息、计算类型及参数配置等。.chemiqout 格式的文件不仅包含了计算任务的配置信息，也包含了计算结果及报错信息。默认导入路径为当前的项目路径；**导出任务**支持导出.chemiq 格式的任务，当有计算结果或报错信息时，支持导出.chemiqout 格式的信息。

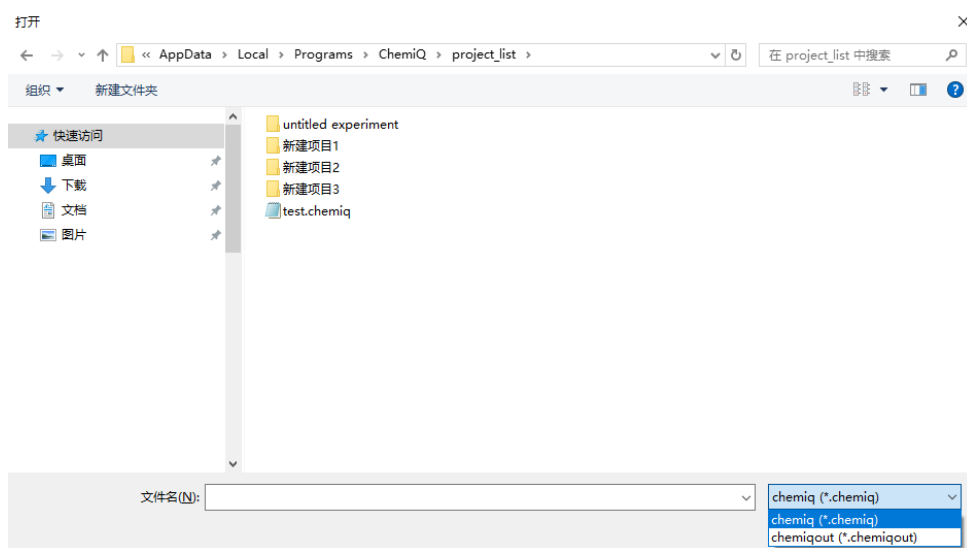


图 4.1: ChemiQ 导入任务

第五章 设置 (S)

设置 (S) 模块包括分子模型、参数配置、开始执行和主题设置，以下详细介绍。



(a) ChemiQ 任务模块

(b) ChemiQ 设置模块

图 5.1: ChemiQ 任务和设置模块

5.1 分子模型

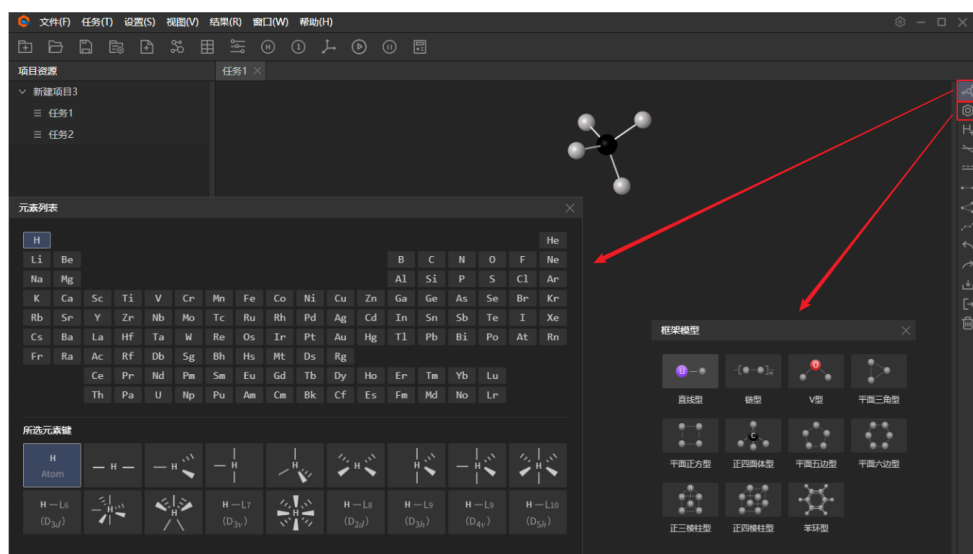












图 5.2: ChemiQ 设置-分子模型

分子模型 (图标 “”) 用于构建分子模型，点击设置-分子模型或者工具栏中的图标，弹出右侧快捷栏，快捷栏从上到下依次为：元素列表、框架模型、一键加氢、断键、加键、调整键长、调整角度、调整二面角、撤销、重做、导入、导出和删除。**元素列表** (图标 “”) 可选择原子以及对应的键型，当前支持前 111 号原子及 18 种键型的构建；**框架模型** (图标 “”) 弹出化学框架用于快速构建分子框架，然后可以点击元素列表替换框架中的原子；**一键加氢** (图标 “”) 可一键补充所有单键的氢原子；断

键（图标“”）支持断开任意两个原子之间的键型，点击“断键”按钮然后选中想要断的原子即可实现；**加键**（图标“”）支持任意两个原子之间添加或更改键型（包括虚键、单键、单虚键、双键和三键）；**调整键长**（图标“”）功能可以调节任意两个原子间的距离，点击“调整键长”按钮后，选中想要调整键长的两个原子后，原子随即高亮显示，中括号内的数字为选中的先后顺序。在弹窗中滑动滑块改变键长。默认调整范围为 0.50 ~ 3.00 Å 弹窗调整界面如图5.3所示。点击“重置”，滑块恢复初始两原子的键长值；点击“确定”，则保存调整后的键长，自动关闭弹窗；点击“x”关闭弹窗，若改动键长后没有点击保存，则默认使用初始键长；**调整角度**（图标“”）功能可以调节任意三个原子间的角度，默认调整范围为 0 ~ 180°；**调整二面角**（图标“”）功能可以调节任意四个原子间的二面角。默认调整范围为 -180° ~ 180°。这三个功能都是默认调整点击的最后一个原子的坐标。**撤销和重做**支持构建分子操作退回上一步或者前进一步；**导入和导出**支持导入导出其他软件生成的文件，增加主流软件的互通性，例如 ChemOffice、Gaussian 等；**删除**（图标“”），选中删除按钮然后回到画布中选中基团即可删除。

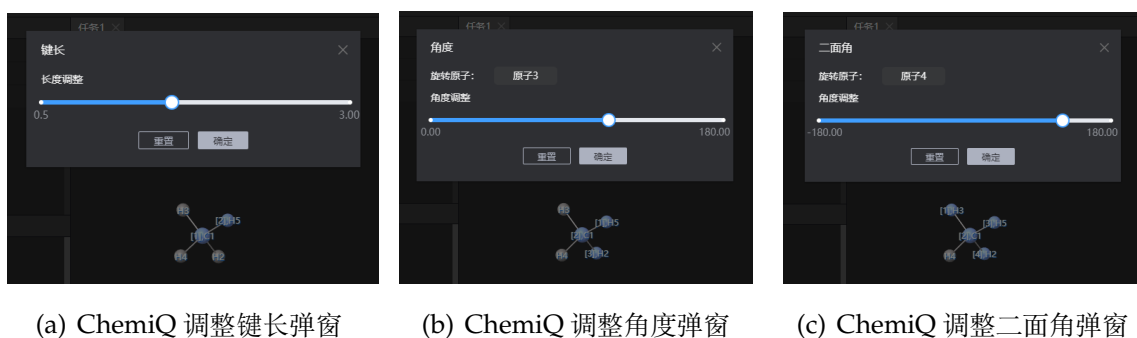


图 5.3: ChemIQ 调整键长、角度、二面角功能

5.2 参数配置

参数配置中包括**计算类型**、**基组**、**电荷**、**自旋多重度**、**映射**、**拟设**和**优化器**。

5.2.1 计算类型

单点能：计算在单一固定几何构型的能量。

势能曲线：沿一几何变量的连续变化计算分子能量，绘制成势能曲线。基于变量生成坐标方式有快速和自定义两种形式（如图5.4(b)）。

动力学模拟：基于量子算法和玻恩-奥本海默近似，模拟原子和分子的运动。其中原子核所受力基于 **Hellmann-Feynman 定理**，该定理依赖于参数 λ ， H_λ 的哈密顿量本征值的一阶导数由哈密顿量导数的期望值给出：

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \left\langle \psi_\lambda \left| \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \right| \psi_\lambda \right\rangle$$



(a) ChemiQ 计算类型一览



(b) ChemiQ 势能曲线的独立参数配置



(c) ChemiQ 动力学的独立参数配置

图 5.4: ChemiQ 参数配置-计算类型

其中 ψ_λ 为特征值 E_λ 对应 H_λ 特征函数, 满足: $H_\lambda \psi_\lambda = E_\lambda \psi_\lambda$; **步数**: 默认 100 步; **步长**: 默认 0.5fs, 意味着每一步运动的时间; **Delta R**: 默认 0.001 Å; **原子速度**: 默认 0.00 Å/fs。(如图5.4(c))。

5.2.2 基组

在量子化学中“基组”指用于构建分子轨道的单粒子函数集。从 V2.4.0 起, ChemiQ 支持常见的 710 个基组及用户自定义基组。支持在 [basis set exchange 网站](#) 上的大部分基组 (除少量过大的基组外), 包括但不限于 STO-nG 基组、Pople 系列基组、Ahlichs 的 def 系列基组、Dunning 系列基组、赝势基组等。下拉菜单栏中支持直接选中的基组有: MINI、STO-3G、STO-6G、3-21G 和 6-31G (如图5.5), 其他基组可直接输入名称, 具体的基组名称字符串输入规则如下:

1. 大写字母转小写字母
2. 保留弥散基组的加号 +
3. 保留极化基组的正反括号 (), 星号 * 转为下划线 _
4. 去除空格, 短横线-, 斜线/

用户自定义基组请将.g94 格式的基组文件放于 ChemiQ 安装目录下的 \ChemiQ \basis 文件夹下 (默认安装路径为 C:\Users\YOURUSERNAME\AppData\Local\Programs\ChemiQ)。请务必确保在基组框中输入的基组名称与基组文件一致, 否则前端程序将会返回报错: XXX.g94 not exist!



图 5.5: ChemiQ 参数配置-基组

5.2.3 电荷

用户可根据计算分子体系的带电性, 选择体系的电性。电荷数为正时无正号, 为负时写负号, 默认值 0。

5.2.4 自旋多重度

1925 年, Friedrich-Hund 首次发现了自旋多重性及其对应的自旋态。通常用于预测自旋多重性的公式是 $(2S + 1)$, 其中 S 是总自旋角动量, $S = \sum m_s$, m_s 是每个原子的自旋磁量子数。绝大多数稳定的分子都有偶数的电子成对排列, 这些被称为单重态 (没有未配对电子数)。具有偶数电子但有两个未配对电子的分子被称为三重态 (2 个未配对电子)。绝大部分中性分子是单重态。(当涉及到简并轨道等等情况会有例外)

5.2.5 映射

量子计算机是以量子比特的语言运行的, 这里的量子比特是一组可区分的粒子。而电子是费米子, 它是以费米子算符的形式表示的全同粒子。因此, 为了在量子计算机上模拟电子结构问题, 我们需要一个映射关系, 将电子的费米子算符映射 (mapping) 到量子计算机的泡利算符 (pauli operator)。目前, ChemiQ 支持 **Jordan-Wigner** 变换、**Parity** 变换、**Bravyi-Kitaev** 变换、**Multilayer Segmented Parity** 变换 (简称 MSPT), 如图 5.6 所示。J-W 变换是所有变换中最简单的变换, 也是其他变换的基础。无论是 J-W 变换、还是其他变换, 费米子哈密顿量映射流程大体可以分为下面两步:

1. 将 Hartree-Fock 态 $|n_m, \dots, n_1, n_0\rangle$ 编码成量子比特态 $|q_m, \dots, q_1, q_0\rangle$;
2. 将费米子体系的产生/湮灭算符用量子比特态的产生/湮灭算符表示出来。



图 5.6: ChemiQ 映射配置

5.2.6 拟设

在含噪声的中型量子器件 (Noisy Intermediate-Scale Quantum, 简称 NISQ) 上, 利用变分量子算法 (如 Variational Quantum Eigensolver, 简称 VQE) 进行化学模拟, 其模拟效果很大程度上取决于用于制备试验态的线路高效性, 而拟设线路是否高效, 可通

过**含参个数**、**线路深度**、**双量子逻辑门的个数**来判断。目前设计拟设线路的思路有以下两种：

1. 从经典量子化学方法（如耦合簇理论）出发，结合量子仿真算法（如特罗特公式），构造量子线路，加速试验态的制备；
2. 直接通过双量子比特逻辑门从 $|0 \cdot 00\rangle$ 态出发制备出试验态。

如图5.7所示，当前 ChemiQ 支持 **UCC (S、D 和 SD)**、**Hardware-Efficient**、**Symmetry-Preserved** 和**自定义拟设**等四种拟设线路，拟设线路是量子计算的重点，下面着重介绍用户如何自定义构建量子线路。

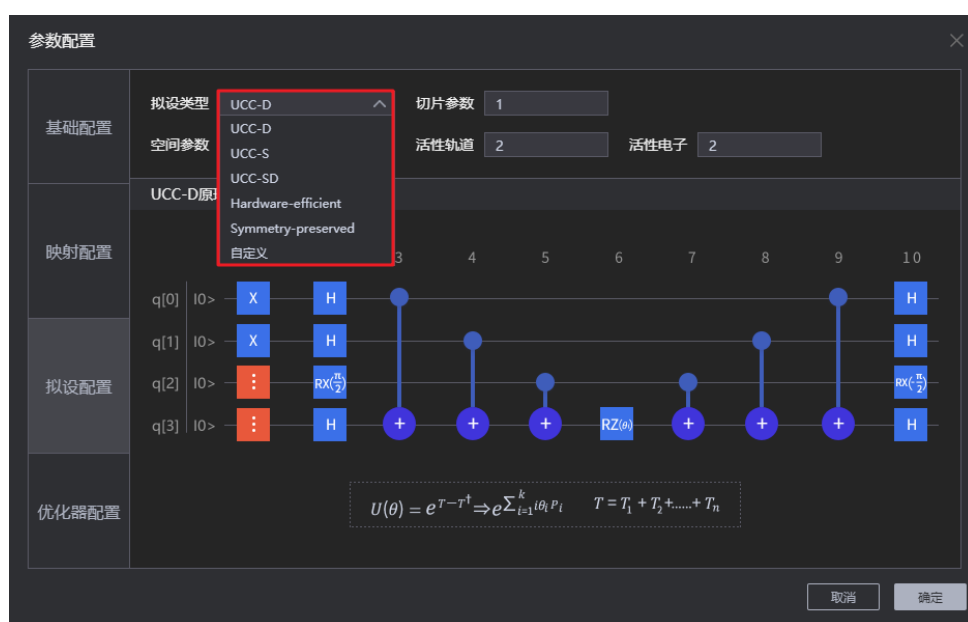


图 5.7: ChemiQ 拟设配置

自定义拟设是通过拖拽量子逻辑门到量子线路上实现拟设线路的搭建。如图5.8展示的自定义拟设线路的图形界面，其中可视化编辑量子线路包括一些参数和功能：

1. **切片参数**：即 Trotter-Suzuki 分解的层数，量子计算模拟分子体系基态能量时切片数越大精度越高；
2. **活性空间**：UCC 提供了一个严格的电子数守恒的过程来描述试验波函数，但相应的电路有一个相对较大的深度，复杂度较高，带来的计算量也随着增大。为了减少复杂度，前人通过将轨道空间划分为活性区域和非活性区域，类比分子系统中划分化学活性电子与非活性、休眠电子；
3. **线路菜单栏**：用户可通过此列表打开线路，选择之前构建的线路，复用或编辑操作，还有保存、清除量子逻辑门操作；
4. **量子逻辑门和操作模块**：这里提供了可以用来搭建线路的不同的逻辑门和操作模块，用户可将其拖动至图形化编辑区域中，组成相应的量子线路。不同类型的逻辑门使用不同的颜色和形状进行区分，其中还有屏障操作，作用是防止线路自适

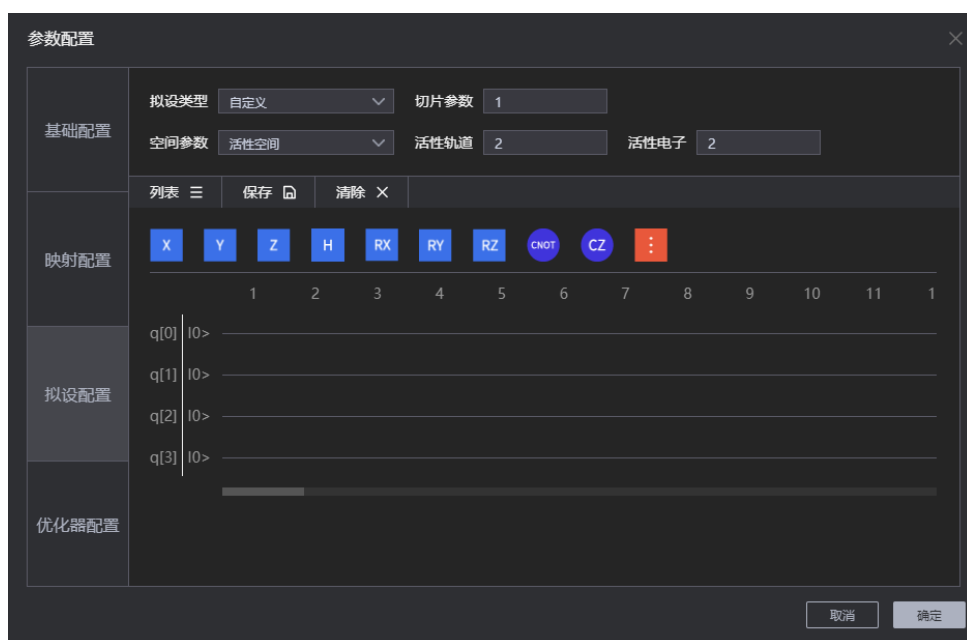


图 5.8: ChemiQ 自定义拟设配置

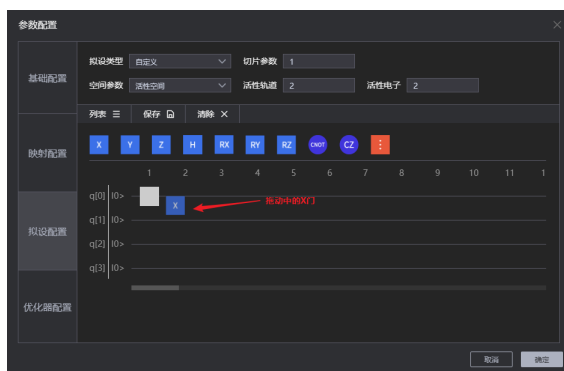
应打乱用户想实现的线路布局，保持时序的正确性，防止逻辑门前移或合并；同时可以起到占位符的作用；

5. **图形化编辑区域**：通过拖拽逻辑门和操作模块实现线路创建，每条水平线代表一个量子比特，其中量子比特的数目对应于空间参数设置，对应规则是：体系的自旋轨道数（根据基组计算）等于量子比特数；

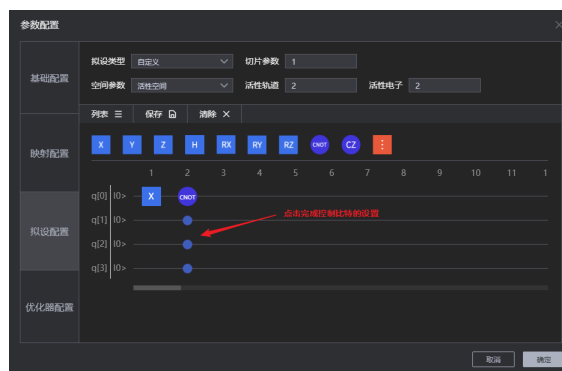
以上是量子线路的参数和功能，接下来搭建一个量子线路学习实际操作：

1. **单比特量子逻辑门的添加**：X、Y、Z、H、RX、RY、RZ 均属于单比特量子逻辑门，作用在单比特上，鼠标左键拖拽到比特线路上即可完成添加。
2. **多比特量子逻辑门的添加**：CNOT、CZ 均属于多比特量子逻辑门，可作用在多个比特上，鼠标左键拖拽到比特线路上完成逻辑门的添加，再次点击逻辑门关联的点，完成逻辑门控制比特的设置。
3. **添加转置共轭**：鼠标单击选中线路上的逻辑门，逻辑门的右边出现 A^\dagger 图标，点击 A^\dagger ，则对逻辑门添加转置成功，逻辑门右上角出现 \dagger 号图标；再次点击 A^\dagger ，则取消转置，逻辑门右上角的 \dagger 号图标消失。
4. **旋转门的角度**：RX、RY、RZ 带角度参数的逻辑门可以对角度参数进行修改；单击逻辑门弹出参数输入框，输入后单击任意处输入框消失。
5. **删除逻辑门**：鼠标单击选中线路中的一个或者多个逻辑门，使用键盘上的 Delete 或者 Backspace 快捷键的删除操作，线路上的逻辑门被删除成功。
6. **保存线路和线路模板**：点击保存按钮，弹出保存线路名称的配置弹框，输入线路名称点击保存，完成线路的本地存储，供下次复用。点击线路列表的线路，可导入

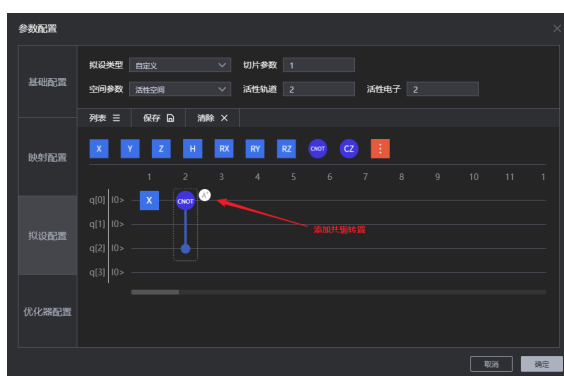
列表项对应的逻辑门。点击列表项后的“x”可从本地删除该条线路模板。



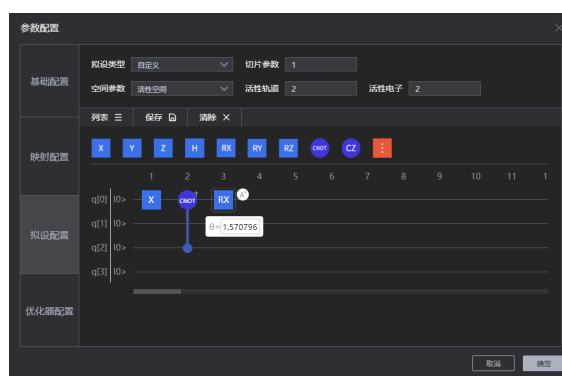
(a) 添加单门



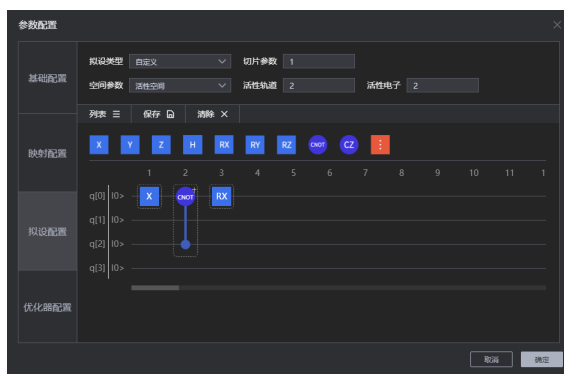
(b) 添加双门



(c) 添加转置共轭



(d) 设置旋转门角度



(e) 选中多个逻辑门



(f) 本地保存的线路列表

图 5.9: ChemiQ 自定义拟设线路搭建

图5.10中展示了自由搭建的拟设线路。自定义拟设量子线路系统支持用户以拖拽的方式自由的添加逻辑门，非常直观的构建量子线路；同时支持自定义线路模板的保存和导入，方便复用。

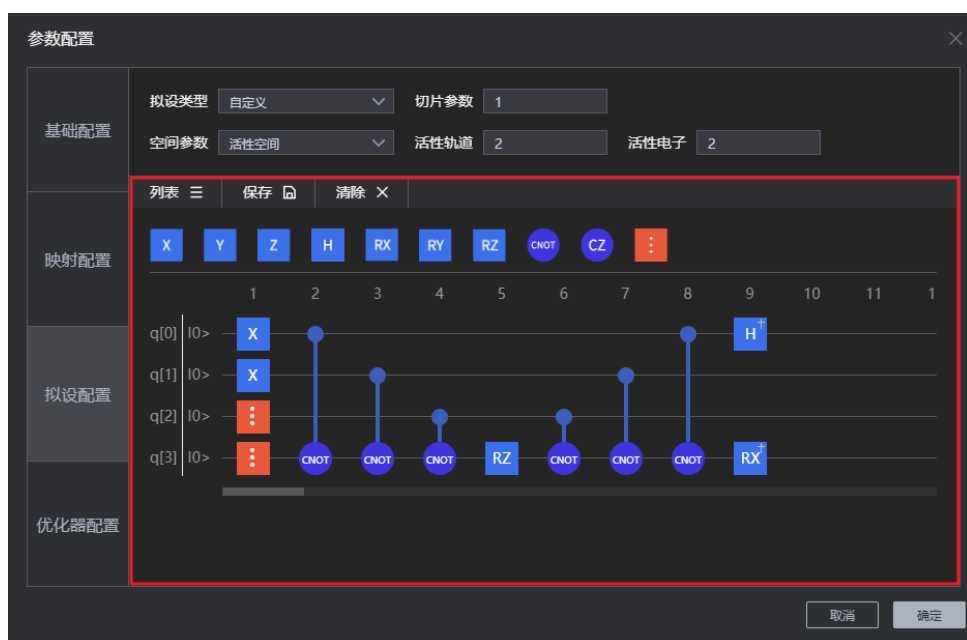


图 5.10: 拟设线路搭建示意图

5.2.7 优化器

ChemiQ 使用连续迭代的方法来寻找分子构型的基态能量，不断迭代直至自洽。我们迭代优化 Ansatz 中涉及的参数以获取能量最低的叠加态，并以此叠加态作为当前分子模型的基态。自版本 V2.3.0 起，ChemiQ 提供了以下几种优化器：**SLSQP**、**NELDER-MEAD**、**L_BFGS_B**、**GRADIENT-DESCENT** 和 **COBYLA**。

除了提供多种优化方法外，ChemiQ 还支持优化方法中相关参数的配置，包括：

- **迭代次数**: 优化器寻找最优参数的最大迭代次数。若该数设置过小，会出现参数尚未达到最优，优化器就停止继续优化。默认的迭代次数为 200 次；
- **函数调用次数**: 是指优化器每次迭代时目标函数的最大调用次数（所以一般情况下将函数调用次数设置成大于等于迭代次数的值）。若调用次数过小，会出现函数值未达到收敛精度，就结束本次迭代，并将当前结果作为本次迭代的结果，这就极有可能错过最优参数。默认的函数调用次数为 200 次；
- **变量收敛精度**: 是指一次迭代中前后两次得到的优化参数最大差距的最小值，若低于该值，结束本次迭代，并将当前参数作为本次迭代的最优参数。精度越小，每次迭代找到的最优参数就越精确，当然，每次调用目标函数的次数也会增多。默认的变量收敛精度为 $1e-5$ ；
- **能量收敛精度**: 是指一次迭代中前后两次得到的函数值差值绝对值的最小值，若低于该值，结束本次迭代，并将当前参数作为本次迭代的最优参数。默认的函数值收敛精度为 $1e-5$ ；
- **优化参数**: 是指用于构造拟设线路的初始参数，由优化器优化，然后传给量子处理器。ChemiQ 支持全零，随机，二阶微扰，也支持用户自定义输入；

- **学习率**: 专属于 Gradient-Descent 优化器, 在寻找参数时用于控制搜索步长。

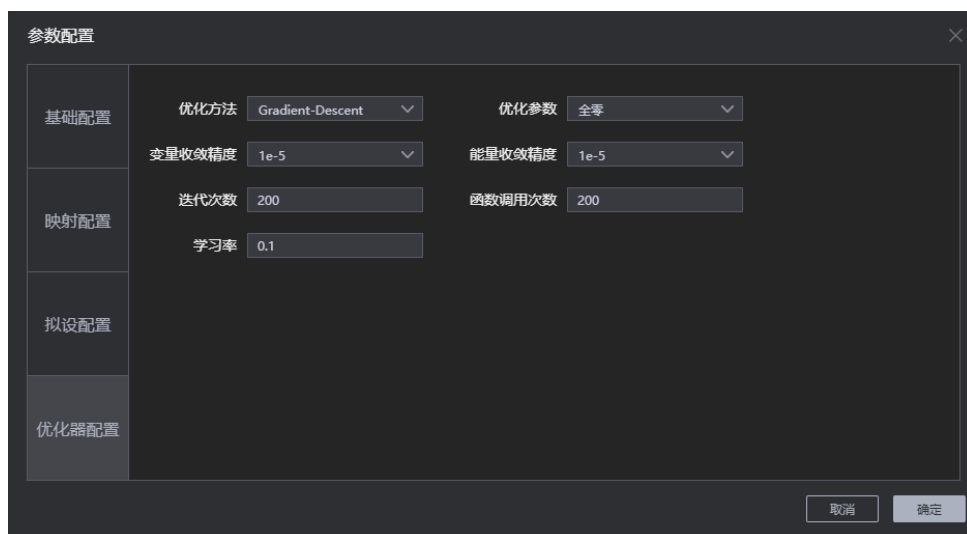



图 5.11: 拟设线路搭建示意图

5.3 开始运行

当分子模型和参数配置设置完毕点击“开始执行”（或者快捷菜单按钮“”）即可进行计算。

5.4 主题设置

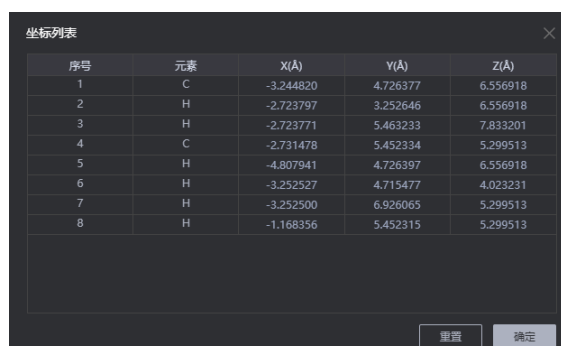
ChemiQ V2.4.0 支持更改画布主题颜色, 并对更改后的颜色进行实时预览。点击“重置”恢复更改前的主题颜色, 点击“确认”应用当前画布颜色。



图 5.12: ChemiQ 更改画布主题颜色

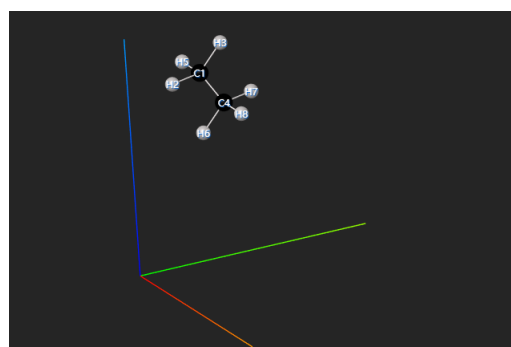
第六章 视图 (V)

视图 (F) 包括坐标列表、元素名称、元素编号和笛卡尔坐标系，其中**坐标列表**是以弹窗形式弹出，可以修改列表中的坐标，主界面中模型根据修改后的即可更新，如图12.3所示；**元素名称**和**元素编号**是直接 在 3D 分子上显示，便于直观显示分子模型和配置参数；**笛卡尔坐标系**是在主界面显示坐标轴，其中红色代表 X 轴，绿色代表 Y 轴，蓝色代表 Z 轴。



| 序号 | 元素 | X(A) | Y(A) | Z(A) |
|----|----|-----------|----------|----------|
| 1 | C | -3.244820 | 4.726377 | 6.556918 |
| 2 | H | -2.723797 | 3.252646 | 6.556918 |
| 3 | H | -2.723771 | 5.463233 | 7.833201 |
| 4 | C | -2.731478 | 5.452334 | 5.299513 |
| 5 | H | -4.807941 | 4.726397 | 6.556918 |
| 6 | H | -3.252527 | 4.715477 | 4.023231 |
| 7 | H | -3.252500 | 6.926065 | 5.299513 |
| 8 | H | -1.168356 | 5.452315 | 5.299513 |

(a) 坐标列表





(b) 笛卡尔坐标系与元素名称与编号显示

图 6.1: ChemiQ 视图模块

第七章 结果 (R)



图 7.1: ChemiQ 菜单栏中的结果模块

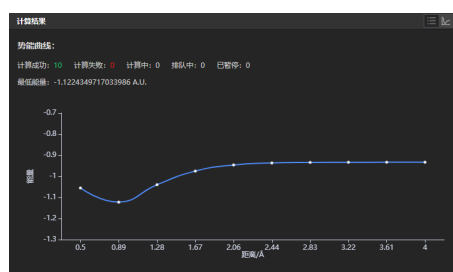
结果 (R) 中展示结果部分包括**计算列表** (或者任务菜单下 (“”)) 和**计算曲线** (或者任务菜单下 (“”)), 前者是以列表形式逐个展示当前任务各个节点的计算结果, 后者计算曲线展示可以把以上列表中的计算任务转换成二维的势能曲线。如图7.2显示计算列表和计算曲线, 在图7.2(a)计算列表中 “xx%” 表示计算进度, “√” 表示计算成功, “!”

表示计算失败；在计算曲线中图7.2(b)代表的是势能曲线，图7.2(c)代表的是动力学曲线；当点击每一个具体节点会显示该节点的详细信息，如图7.3所示展示信息。

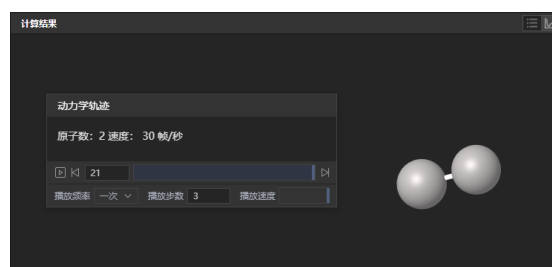
当提交的任务是多节点时，如果用户发现某个计算节点不合理，可以点击“删除当前计算”，删除该节点任务。但值得注意的是，如果任务是计算单点能量，则无法操作该按钮，因为计算的是一个节点的单点能量(仅一个节点无法删除)。

| 计算结果 | | |
|------|------------------------------|------|
| #1 | 能量: -39.348883807421245 A.U. | ✓ 删除 |
| #2 | 能量: -39.251544508012664 A.U. | ✓ 删除 |
| #3 | 能量: -39.23088424626627 A.U. | ✓ 删除 |
| #4 | 能量: -39.22779084153895 A.U. | ✓ 删除 |
| #5 | | ✗ 删除 |

(a) ChemiQ 计算列表



(b) ChemiQ 势能面曲线



(c) ChemiQ 动力学轨迹

图 7.2: ChemiQ 结果模块

导出当前结果和导出所有结果可以为单点能（单节点）、势能曲线（多节点）导出结果，导出的结果就是在结果导出选项中选择的结果属性进行导出，如图7.4(a)所示。导出当前结果是导出选中的节点结果（TXT 文件），导出所有结果是对一个任务所有节点导出。导出结构图片如图7.4(b)所示导出透明背景的结构图。

另外，ChemiQ 计算产生的输出文件默认路径为文件-项目管理中项目路径（如图7.5(a)所示）查看计算产生的输出文件路径：C:\Users\BY220037\AppData\Local\Programs\ChemiQ\project_list\示例项目，可查看到如图7.5(b)所示的几个任务，包括动力学模拟和势能曲线，文件夹中包含的为该任务计算时产生的输出文件。例如动力学结果，如图7.6，从上至下是：报错信息文件、分子拓扑信息文件、分子轨迹文件、计算进度相关信息、chemiq 计算输出文件。

第八章 窗口 (W)

窗口 (H) 支持对主界面窗口的一些操作，包括关闭窗口和关闭所有窗口。其中，关闭窗口即为关闭上方状态栏的任务，关闭所有窗口为关闭上方状态栏所有的任务。值得

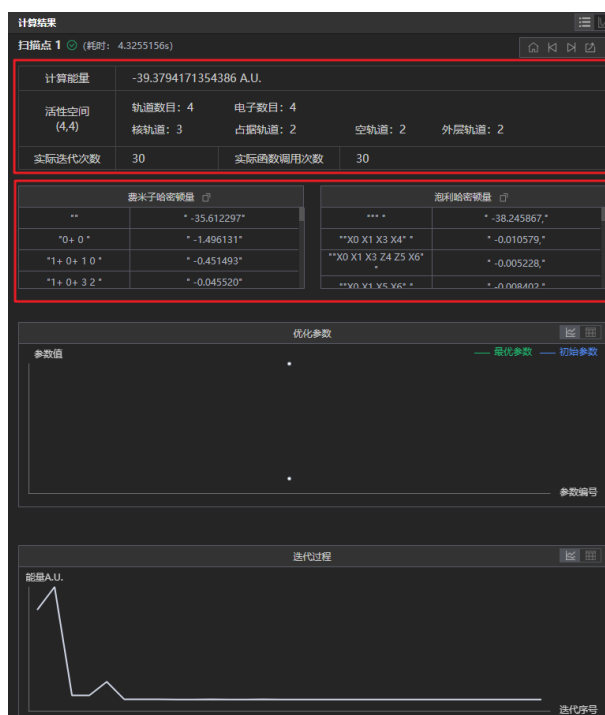
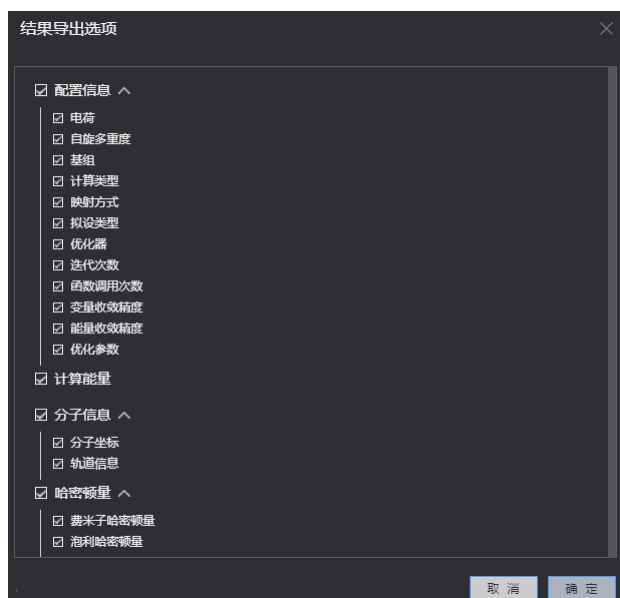
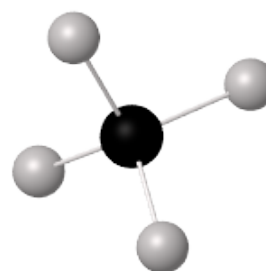


图 7.3: ChemiQ 计算节点详情

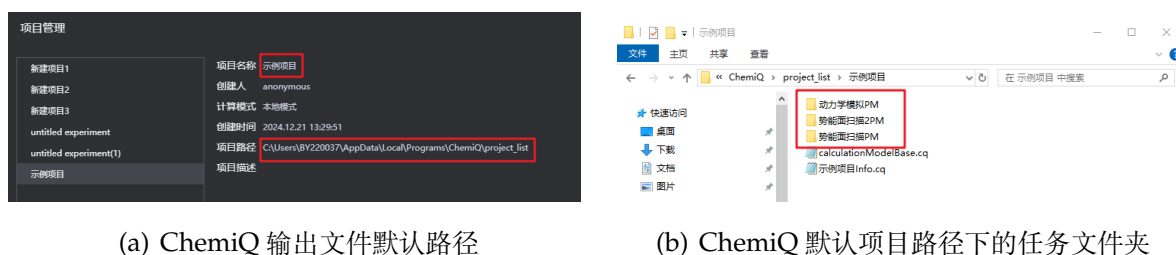


(a) ChemiQ 结果导出选项



(b) ChemiQ 导出结构图片

图 7.4: ChemiQ 结果模块-导出选项



(a) ChemiQ 输出文件默认路径

(b) ChemiQ 默认项目路径下的任务文件夹

图 7.5: ChemiQ 结果保存示例

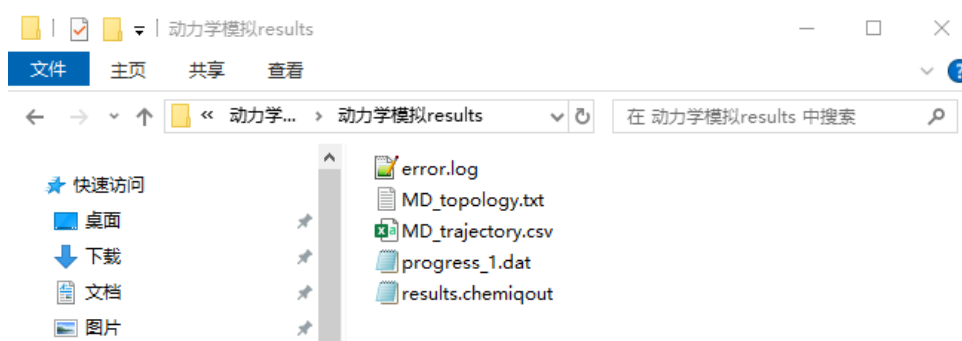
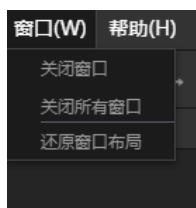


图 7.6: ChemiQ 动力学结果文件

一提的是用户如果窗口调整的过于凌乱又或者对软件不熟悉找不到局部窗口细节可以点击“**还原窗口布局**”即可一键还原初始窗口布局。

第九章 帮助 (H)

帮助 (H) 帮助用户快速熟悉软件、使用软件和反馈意见。**快速教程**支持快速查看计算示例，以视频的形式展现在用户面前；**使用手册**支持详细了解这款量子计算化学软件，可以像书籍一样供使用者查看，对于使用过程中遇到的问题都能及时查阅；**官方网站**可以直接链接公司官网，查看公司的简介和其他产品，还有一些关于量子算法的学习等等；**反馈意见**可以随时反馈使用过程中遇到的问题；**未激活/已激活**展示软件是否激活成功详见2.2试用和激活一节；**关于**展示 ChemiQ 软件的基本信息，包括版本号和软件版权等等。



(a) ChemiQ 窗口模块




(b) ChemiQ 帮助模块

图 9.1: ChemiQ 窗口和帮助模块

第三部分 计算操作流程

第十章 创建项目

ChemiQ 2.4.0 任务类型有三种，分别是**单点能**、**势能曲线**和**动力学模拟**，单点能就是计算单个几何结构下的能量；势能面扫描可以基于距离、角度和二面角，在计算化学家的心中势能面扫描是非常具有研究价值，可以找到复杂的大分子反应中的过渡状态从而为反应机理的研究提供很强大的分析工具，过渡态初始构型的猜测决定了我们是否能够顺利找到过渡态，而势能面扫描就为我们提供了一种有效的确定过渡态初始构型的方法；动力学模拟可以研究溶剂化动力学（Solvation Dynamics），振动弛豫（vibrational relaxation），反应动力学（reaction dynamics）等。单点能、势能曲线和动力学模拟，一般完整步骤包括：**创建项目**、**新建任务**、**分子模型**、**参数配置**、**开始计算**和**结果模块**。在 ChemiQ 初始界面点击过渡页的“创建项目”、图标“”和文件 - 创建项目三种方式都可以，“创建项目”界面，可以自定义“项目名称”、“创建人”、“计算模式”、“保存路径”和“项目描述”内容。信息填写完成后点击“下一步”，进入主界面。

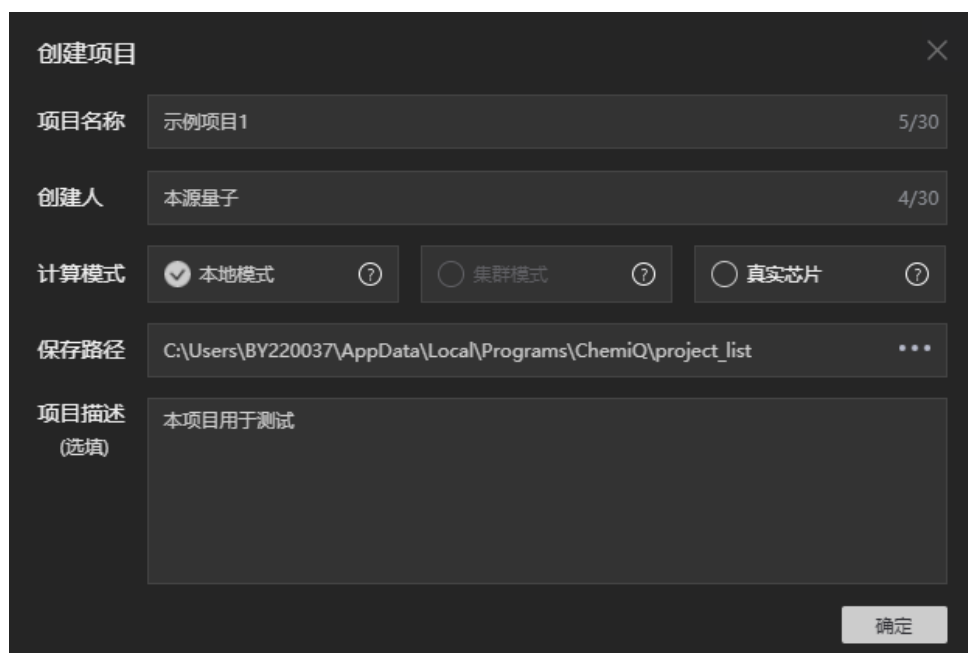


图 10.1: ChemiQ 创建项目界面

第十一章 新建任务

创建项目进入主界面，工具栏没有置灰从左到右为：创建项目、打开项目、保存、项目管理、创建任务和分子模型，如图11.1所示：

这时候意味着可以创建项目并进入新的项目、管理项目和任务或者建立分子模型。

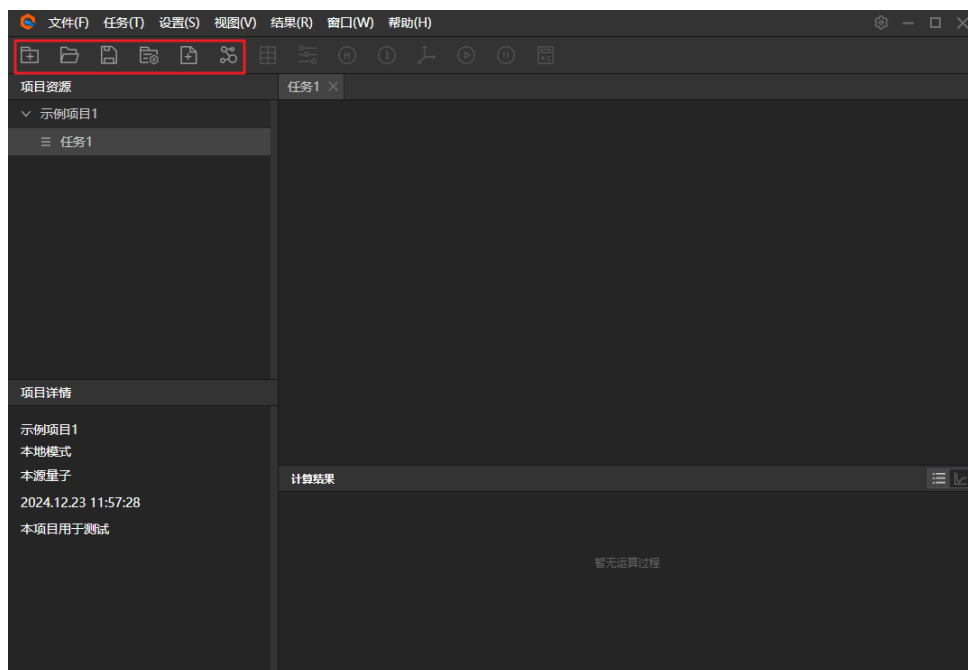




图 11.1: ChemiQ 新建任务界面

项目概念即一个文件夹形式，同一个项目下的计算模式是相同的（本地模式，集群模式或真实芯片），一个任务对应一个分子模型不同的配置参数，点击“任务-新建任务”、图标“”或者在任务 1 上右键点击新建任务，三种方式建立新的任务，值得一提的是创建项目时会附带一个新的任务。

通过任务模块-导入任务或者在任意任务上点击右键，可以唤出导入任务功能，模块说明详见第四章。

第十二章 分子建模

ChemiQ 目前支持使用元素周期表中前 111 号元素和 18 种键型的分子模型搭建，当点击设置 - 分子模型或点击图标“”弹出右侧编辑分子的快捷栏目如图 12.1 所示：

12.1 添加原子

显示右侧任务栏目后即可编辑分子模型如图下所示，从上至下为：元素列表、框架构型、一键加氢、断键、加键、调整键长、调整角度、调整二面角、撤销、前进、导入、导出和删除，元素列表和框架模型详情如图 12.2 所示。

12.2 分子信息

在“视图”模块可以便于显示原子和分子的信息包括元素编号、元素名称、坐标列表和笛卡尔坐标系可直观进行便利操作，如图 12.3 所示，坐标列表是弹窗，并且可移动；

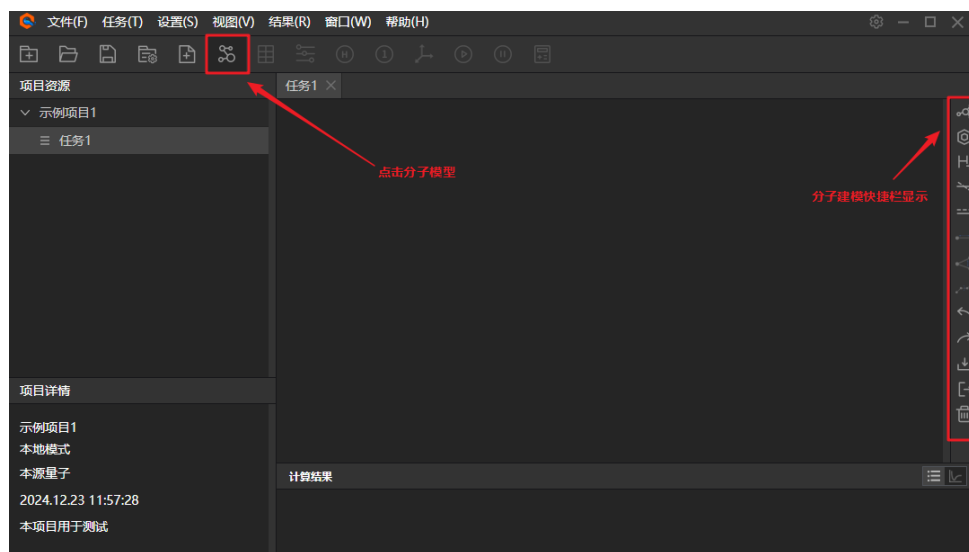


图 12.1: ChemiQ 分子建模界面

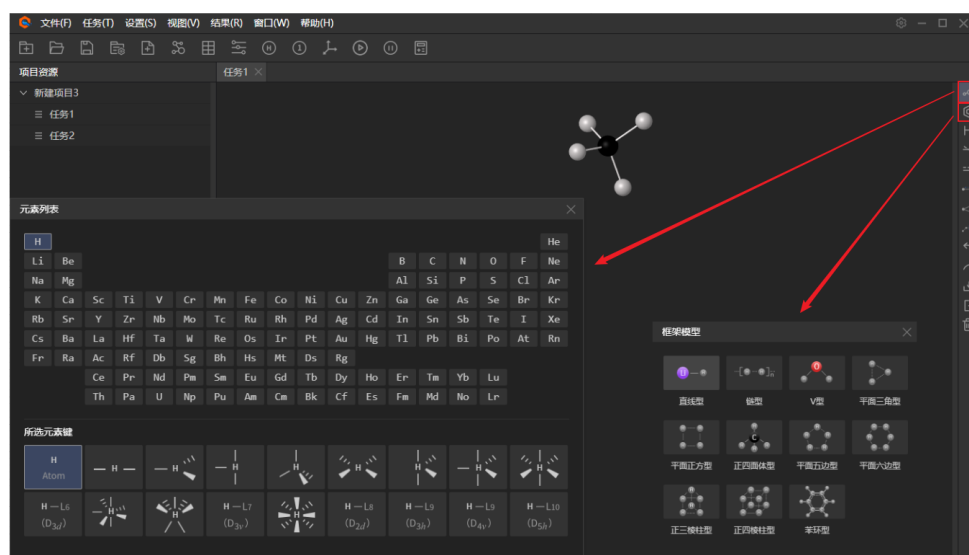
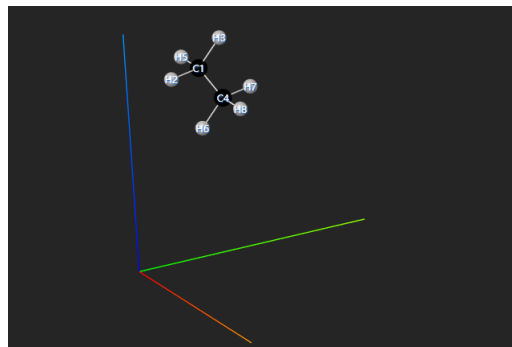


图 12.2: ChemiQ 添加原子界面

元素名称和元素编号是直接展示在分子模型上；笛卡尔坐标系是在主界面以坐标系的形式显示出来。

| 序号 | 元素 | X(A) | Y(A) | Z(A) |
|----|----|-----------|----------|----------|
| 1 | C | -3.244820 | 4.726377 | 6.556918 |
| 2 | H | -2.723797 | 3.252646 | 6.556918 |
| 3 | H | -2.723771 | 5.463233 | 7.833201 |
| 4 | C | -2.731478 | 5.452334 | 5.299513 |
| 5 | H | -4.807941 | 4.726397 | 6.556918 |
| 6 | H | -3.252527 | 4.715477 | 4.023231 |
| 7 | H | -3.252500 | 6.926065 | 5.299513 |
| 8 | H | -1.168356 | 5.452315 | 5.299513 |

(a) 坐标列表



(b) 笛卡尔坐标系与元素名称与编号显示

图 12.3: ChemiQ 分子信息


12.3 旋转、缩放和平移分子

点击某个原子不放开并来回移动鼠标左键可以整体旋转原子；滑动鼠标滚轮可以缩放原子；鼠标右键并点击某个原子不放来回整体移动原子。更具体的操作详见第2.3.4章节。


12.4 编辑坐标列表

原子的平移或者构型的调整还可以通过直接编辑“坐标列表”来实现。如图12.4所示可来回拖拽并且可进行编辑更改坐标信息。


12.5 删除原子

分子模型快捷栏按钮“”可删除分子；或者键盘 delete 键删除“视图”上的所有元素；或者主界面右键 - 剪切也可达到删除分子的目的。

12.6 快捷操作

选中分子模型快捷栏按钮“”后，点击化学键两端的原子即可删除化学键，继续点击继续删除；加键也是同理；撤销和前进可记忆性的前进和后退。

12.7 导出分子模型

选中快捷栏导出图标“”后，即可将当前所构建的分子模型从 ChemiQ 导出到文件中，便于以后的重复使用，当前导出的格式如图12.5所示有三种导出的格式：gjf、

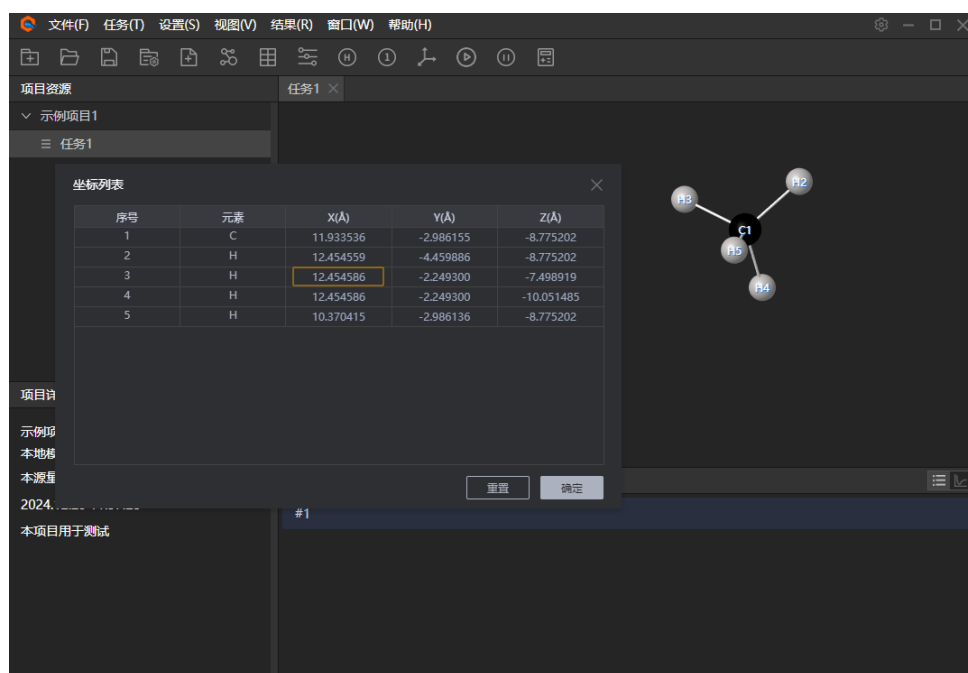


图 12.4: ChemiQ 编辑坐标列表

mol2 和 pdb 格式。

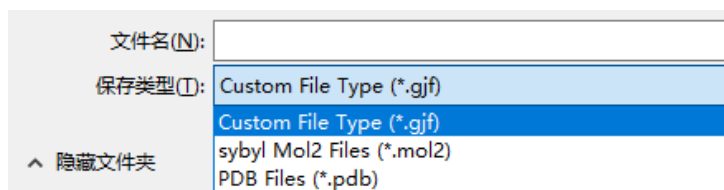



图 12.5: ChemiQ 导出分子模型

12.8 导入分子模型

选中快捷栏目的导入图标“”后，即可将先前所构建的分子模型从文件中导入到主视图中，提高分子模型构建效率，也可以把同类软件产生的文件导入到 ChemiQ 进行计算，如图12.6所示是 gaussian 产生的葡萄糖苷 gjf 文件导入：

第十三章 参数配置

ChemiQ 除了需要设置计算类型、基组、电荷和自旋多重度等基本信息外，还需要设置量子计算的核心参数：**映射**、**拟设**和**优化器**（详细介绍见链接部分 - 第五章设置模块）

映射：在“映射”模块中，可以选择不同的映射方式，目前 ChemiQ 支持 Jordan-Wigner 变换、Parity 变换、Bravyi-Kitaev 变换、Multilayer Segment Parity 变换（简称 MSPT）；

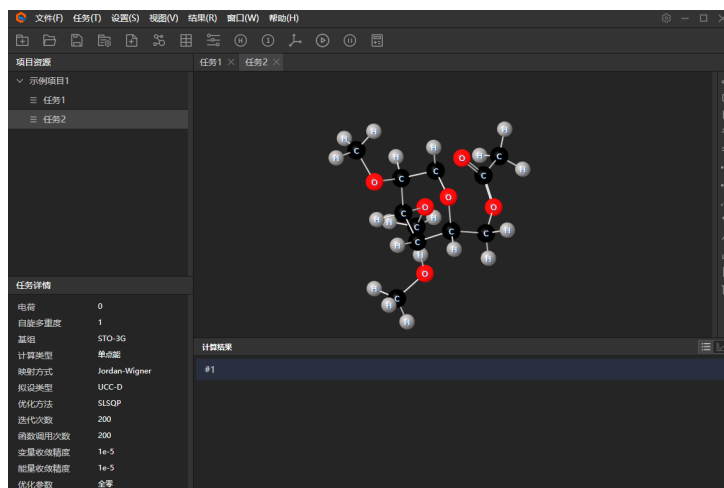



图 12.6: ChemiQ 导入分子模型

拟设: 在“拟设”模块中，可以在下拉框中选择不同的拟设，目前 ChemiQ 支持 UCCS、UCCD、UCCSD、Hardware-Efficient、Symmetry Preserved 和自定义拟设，用户可根据自己体系来选择对应的拟设线路；

优化器: 在“优化器”模块中，可以配置 SLSQP、Nelder-Mead、L_BFGS_B、Gradient-Descent、COBYLA 五种优化器。

第十四章 开始计算

点击工具栏中的运行图标“”，“计算结果”会生成任务各个计算节点的计算进度或状态，如图14.1所示。




ChemiQ 中除了能看到计算进度，还提供“暂停”()、“重新计算”()选项和“删除”()选项管理当前节点的计算。若当前任务的计算节点个数超过 ChemiQ 可调度的计算资源，则剩余节点的计算将处于排队状态。



图 14.1: ChemiQ 计算进度

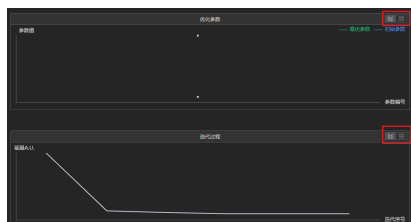
第十五章 结果展示

节点计算结束后，若计算成功，则会直接显示单点能，如图15.1，双击该节点，可以进入“计算列表”模块下的“结果详情”界面，该界面不仅展示了该构型最优能量、实际迭代次数、分子坐标、哈密顿量等信息，还给出了优化器最优参数和每次迭代的结



图 15.1: ChemiQ 结果展示-成功

果。为了让更直观地了解优化参数和迭代能量的改变，ChemiQ 除了提供上图中的表格展示形式，还提供了图线展示形式，如图15.2(a)所示。



(a) 单节点结果表格和折线展示形式



(b) 不同结果间切换

图 15.2: ChemiQ 结果详情

此外，可以通过“向前向后”选项在不同节点计算结果间切换，可以通过选项返回各节点计算进度或状态展示界面，如图15.2(b)所示。若计算失败，则显示“!”，如图15.3所示，**结果导出选项**，可以自定义导出哪些计算信息；**导出当前结果**可导出当前节点的计



图 15.3: ChemiQ 结果展示-失败

算结果；**导出所有结果**可导出任务下的所有节点结果；**导出结构图片**可把分子模型以图片的格式导出 3D 模式。

15.1 计算结果复用

为了方便使用计算结果中的信息，ChemiQ 支持计算结果的复用（包括报错信息）、哈密顿量和坐标信息的复制、所有节点计算结果的导出。这样就可以高效地利用已有的计算结果布置后续计算任务或移植到其他地方。比如，可以利用计算得到的各节点优化器最优参数，再新建一个计算任务副本，保持其他配置不变，只对“优化器”做更改，选用不同优化方法、并将最优参数按“自定义”方式填入“优化参数”栏中，就可以做进一步计算了。

15.2 计算任务复用

定位任务右键会弹出新建任务、新建副本、删除任务和重命名，其中，“新建副本”仅复制当前任务的配置，不复制结果，ChemiQ 这样设计的目的：其一，是为了方便高效布置一组对照计算任务，此时仅需对相关配置稍作修改，如只修改中心原子、配位原

子、带电情况、自旋多重度等；其二，是为了方便修改个别配置错误，在计算过程中若发现个别配置错误，可通过“新建副本”的方式，在原有配置上进行相应修改，就可重新计算，而不用从零开始配置一遍。

需要注意的是，若计算任务已完成，不满意计算结果或想修改个别配置，此时新建副本会出现弹窗，询问是覆盖当前计算任务还是建立副本。

第十六章 集群计算

ChemIQ 自 V2.3.0 支持集群计算，主要操作流程如下：

1. 点击“文件”→创建项目，选择集群模式。
2. 参数设置完成后，点击“运行”按钮，输入“主机 IP: 端口”。
3. 再次点击“运行”按钮，开始计算。

(备注：集群模式目前暂未对个人用户开放。)

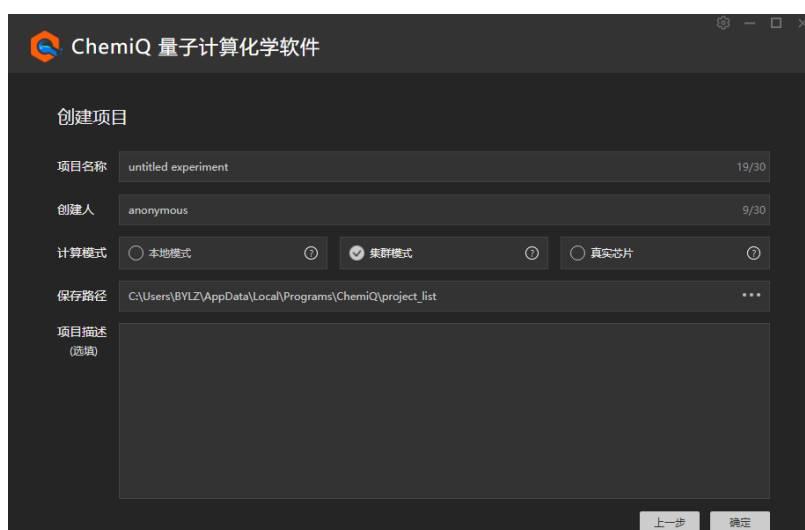
第十七章 真实芯片计算

ChemIQ V2.4.0 支持真实芯片计算，本源量子提供强大的量子计算服务能力，通过在 ChemIQ 软件内调用“悟空”超导量子芯片等不同硬件芯片，可以体验真实量子芯片带给计算化学的革命性计算体验。

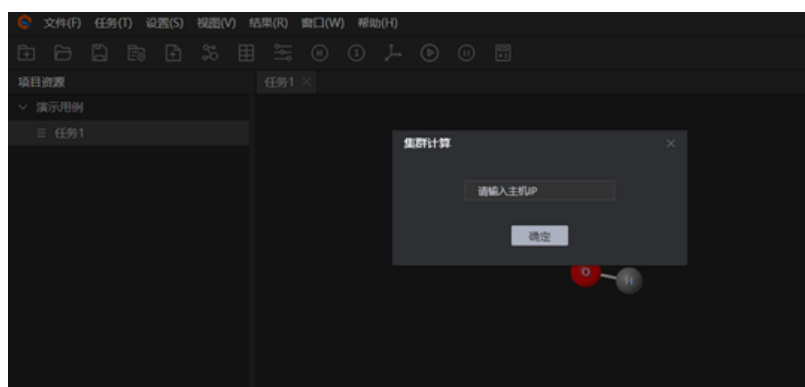
“悟空”超导量子芯片是本源第四代超导量子计算机“本源悟空”的核心器件。该芯片集成了超过 100 位计算量子比特，同时包含超过 180 位耦合比特，结合频率可调超导量子比特技术，保证极高的灵活性与可调控性；配合专业的测控软硬件技术，可确保量子逻辑门操作的高保真度与稳定性，提升量子计算的准确性与效率。

如图 17.1(a)，在新建项目的计算模式中选择真实芯片；构建完分子模型后，在参数配置的芯片配置一栏，需要配置更多芯片相关的参数，如图 17.1(b) 所示。**APIKEY** 指的是每个用户通过 ChemIQ 访问量子云计算资源的标识符，可以在量子云平台上进行查询剩余机时，复制 APIKEY 等操作。**计算后端** 下拉栏中可以选择计算使用不同的硬件芯片；**运行次数** 指的是量子线路在真实量子计算机上进行概率测量的采样次数，采样次数越高，统计误差越小，但计算所需的耗时也越长。默认的采样次数为 1000 次；**线路自动优化** 是指自动在线路编译时使用算法合并逻辑门，以减少线路深度，默认为 True；**M3 修正** 指的是测量时开启误差修正，修正会让概率结果更精确，默认为 True；**自动映射** 指的是自动在真实芯片拓扑结构上挑选出符合量子线路结构的量子比特，默认为 True。

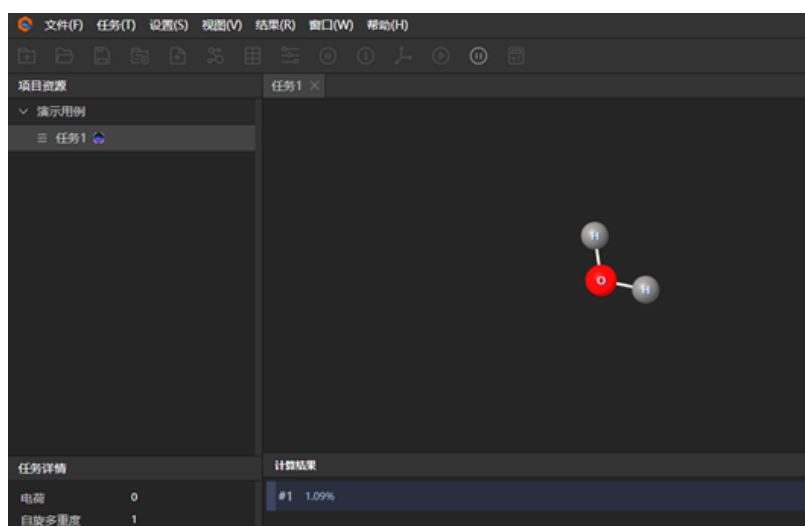
需要注意的是，在真实芯片计算模式下，原有的配置参数有了更多的限制，在基础配置中，计算类型只可选择单点能，势能曲线和动力学模拟不可选；拟设配置中，只可选 Hardware-efficient 和自定义拟设；在真实芯片计算模式下，暂不支持优化器配置。



(a) 计算模式选择集群计算



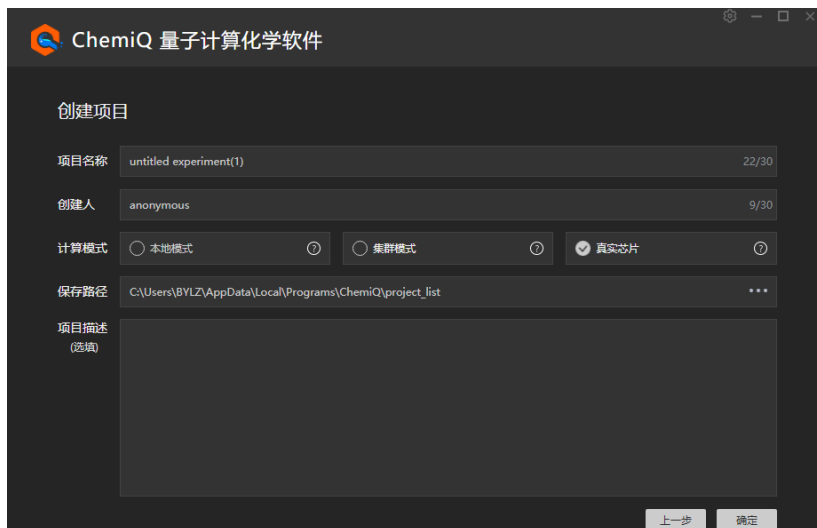
(b) 输入 IP



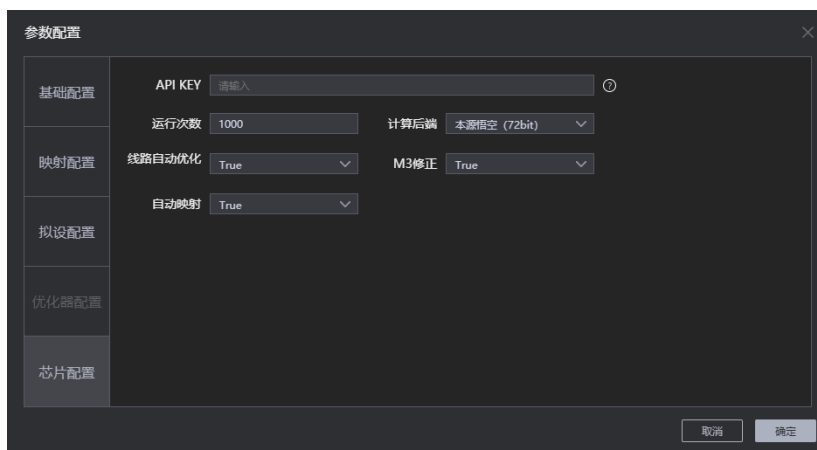
(c) 集群计算进行中

图 16.1: ChemiQ 集群计算设置

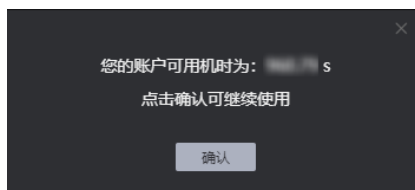
设置完毕后，后端会自动校验 APIKEY，如果还有剩余机时可用，前端会提示是否确认使用，如图17.1(c)所示。点击确认后即可使用真实芯片执行计算任务。



(a) 计算模式选择真实芯片计算



(b) 真实芯片配置



(c) 剩余机时提醒

图 17.1: ChemiQ 真实芯片计算设置

附录

附录 A ChemiQ V2.3.0 新增

ChemiQ V2.3.0 新增:

- 自由构建量子线路功能
- 活性轨道和冻结轨道等参数
- 试用期功能
- 断点续算功能
- 集群计算功能

附录 B ChemiQ V2.4.0 新增

ChemiQ V2.4.0 新增:

- 真实芯片计算功能
- 元素周期表中前 111 号元素和 18 种键型的分子模型搭建
- 自定义基组计算
- 分子建模更改键长、角度、二面角功能
- 导入和导出.chemiq 配置文件和.chemiqout 计算结果文件
- 客户端国际版页面的支持
- 可视化导入任务中的自定义拟设线路
- 画布背景颜色支持用户自定义调整
- 优化导出分子模型图片中原子键显示样式