

杉崎 研司

大阪市立大学大学院理学研究科
特任講師

量子化学計算のための高効率量子アルゴリズムの開発

§ 1. 研究成果の概要

量子コンピュータによる量子化学計算を実際の化学研究に役立てられるようにするために、基底状態と多数の励起状態がエネルギー的に近接した擬縮退系を簡便に取り扱えるような新規手法・量子アルゴリズムの開発を進めている。2019 年度は、断熱量子アルゴリズムを用いて分子の波動関数を生成する断熱状態生成法 (Adiabatic State Preparation; ASP) を適用して擬縮退系の Full-CI 波動関数生成を実行するための第一段階として、波動関数の時間発展量子シミュレーションに用いられる Trotter 分解によるエラーの見積もりを行った。電子スピン演算子 S^2 のもとでの波動関数の時間発展量子シミュレーションにおいて、以前に提案した一般化スピン座標マッピング法によるアプローチを用いると、従来法である Jordan-Wigner 変換に基づくアプローチと比較して Trotter 分解のエラーが大幅に抑えられることを明らかにした。また、一次の Trotter 分解ではなく二次の Trotter 分解を適用することで Trotter 分解のエラーが大きく改善され、二次の Trotter 分解と一般化スピン座標マッピング法を併用することで波動関数の時間発展量子シミュレーションを ASP 法に十分な精度で実行できることを明らかにした。

また、断熱状態生成法では、時間発展量子シミュレーションを実行する際に、ハミルトニアンを時間変化させる。このハミルトニアンの時間依存形として様々な関数を検討し、擬縮退系の断熱状態生成計算に最適な関数系の探索を行った。