

水上 渉

大阪大学先導的学際研究機構
特任准教授（常勤）

計算化学のフロンティアを拓く革新的複素数波動関数量子シミュレータの開発

§ 1. 研究成果の概要

量子化学計算は量子コンピュータの有望な応用先と見られており、現在様々な研究がおこなわれている。その中で本研究は、古典コンピュータに比べて優位を発揮しやすいと予想される複素数波動関数があらわれる問題に焦点を当てたアルゴリズム開発に取り組んでいる。本年度は、1) 周期境界条件を考慮した結晶系と、2) 重原子の電子状態で重要になってくる相対論効果を正しく記述できる Dirac 方程式のそれぞれに対する変分量子固有値法(VQE)の開発に着手した。前者は Γ 点のみを考慮した場合について実装を終え、岩塩型 LiH 結晶に適用をおこなった。k 点を考慮した場合への拡張を次年度に予定している。後者に関しては No-pair 近似を用いて負状態を取り除いた形で実装し、ヨウ化水素への適用をおこなった。現時点では、計算コストの問題でより重い元素を含む系への適用は難しいが、この課題は古典アルゴリズムの効率化により解決できる見込みである。また、VQE 自体の適用範囲を広げるために、解析的一次微分法の実装をおこなった。開発した手法(OO-UCCD)により、VQE を用いた多原子分子の構造最適化を実現した(図1)。さらに、VQE ベースの摂動論を開発し、これまで量子ビット数の関係で取り込みが難しかった動的相関の記述を可能とした(図2)。

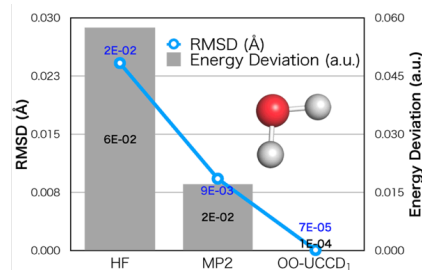


図 1

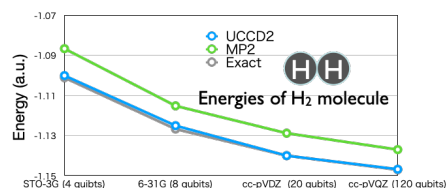


図 2