

革新的な量子情報処理技術基盤の創出
2019 年度採択研究者

| |
|------------------|
| 2020 年度 年次報告書 |
|------------------|

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かつ効率的に取り扱うことができる新規手法・量子アルゴリズムの開発を進めている。2020 年度には量子コンピュータ上で、望んでいる電子状態とは異なるスピン成分が混入し、スピン汚染された波動関数からスピン汚染源を取り除くことができる確率的スピン汚染除去法を提案した。本手法は量子サーキットの任意の箇所に挿入可能であり、量子ゲートの不正確性や量子ビットのデコヒーレンスなどによるエラーだけでなく、Trotter 分解などの数値的エラーに由来するスピン汚染を適宜修正することが可能となる。また、波動関数の時間発展とベイズ推定を組み合わせることで、原子・分子の全エネルギーを求めることなく、スピン量子数が異なる電子状態間のエネルギー差を直接計算できる新規量子アルゴリズムを開発した。本手法は従来法である量子位相推定と同様に計算時間の指数加速が保証されているうえ、量子位相推定で必須の制御時間発展演算が不要で、実装が容易なアルゴリズムである。さらに、量子アニーリング法で励起エネルギーを直接計算する新規手法を開発した。これらの成果は 4 報の学術論文で発表した。さらに、断熱量子アルゴリズムの一種である断熱状態生成法(ASP 法)を用いて擬縮退系の full-CI 波動関数を効率的に生成するためのペナルティ関数の検討、時間発展長さの事前決定法、初期波動関数の選択方法の開発を行った。また、量子コンピュータによる量子化学計算に関する教科書を執筆・出版した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “A probabilistic spin annihilation method for quantum chemical calculations on quantum computers”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2020**, *22*, 20990–20994. (DOI: 10.1039/D0CP03745A)
- 2) “A quantum algorithm for spin chemistry: a Bayesian exchange coupling parameter calculator with broken-symmetry wave functions”, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 2121–2132. (DOI: 10.1039/d0sc04847j)
- 3) “Direct estimation of the energy gap between the ground state and excited state with quantum annealing”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **2021**, *60*, SBBI02. (DOI: 10.35848/1347-4065/abdf20)
- 4) “Quantum algorithm for the direct calculations of vertical ionization energies”, *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, *12*, 2880–2885. (DOI: 10.1021/acs.jpcclett.1c00283)
- 5) 「量子コンピュータによる量子化学計算入門」, 講談社, 2020 年 12 月出版 (ISBN: 978-4065218273)