

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
------------------

倉重 佑輝

京都大学 大学院理学研究科  
特定准教授

量子-古典空間分離法を用いた量子多体系ソルバーの開発

## § 1. 研究成果の概要

化学物質の機能や反応性を量子力学に基づいた電子波動関数の計算から理論的に予測する量子化学計算を、近い将来利用可能になると予想される中規模量子コンピュータ上で実行可能にすることを目的とした手法の量子-古典空間分離法の構築のために、前年度に開発した量子アルゴリズムである unitary cluster-Jastrow (uCJ) ansatz に基づく量子変分計算により得られる量子表現空間における波動関数から高次情報である縮約密度行列を計算し、古典表現空間との電子相関効果を古典計算機上で多項式オーダーのメモリ使用と計算時間で後処理計算として行うスキーム (quantum to classical: Q2C スキーム) の開発を行った。本スキームのボトルネックは量子計算から古典計算にインターフェースするための縮約密度行列の計算であることから、擬正準軌道を利用することで計算オーダーを低減するアルゴリズムを開発し実装した。開発した多参照摂動法の uCJ-PT2 法の現実問題への有効性を実証するために銅複核錯体の異性化反応について反応座標に沿って分子構造を変化させながら構造ごとにエネルギー計算を行うことでポテンシャル曲線の予測を行なった。大規模古典計算との比較から、クラスタ演算子を2個重ねた uCJ 法が量子表現空間での厳密解並びにそれを参照関数とした2次摂動法の結果を十分な精度で再現することが示された。