

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

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。その中で本研究では、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をおこなっている。本年度は、周期境界条件を考慮した結晶系に対する変分量子固有値法(VQE)の開発進め、 Γ 点以外の k 点も考慮したVQE計算を実現した。加えて、この結晶系に対するVQEをベースに、部分空間展法(QSE)の応用することで、準粒子バンド構造の計算をおこなう方法を構築した。本手法では、拡張Koopmansの定理を用いて、イオン化状態と電子付加状態をバンドと対応させ、それぞれの状態を展開するのに必要な部分空間をVQEにイオン化(電子付加)演算子を作用させることで生成している。さらに、VQEと古典コンピューティングの手法である変分モンテカルロ法(VMC)との対応関係に着目し、結晶系に対するVQEの手法をVMCに転用することもおこなった。相対論的量子化学に対しては、他の量子化学プログラムパッケージとのインターフェースを拡充させ、AuHのような重原子を含む系への応用も可能とした。次年度以降に時間反転対称性を活かした相対論的量子化学ならではの高速化に取り組む予定である。さらに今年度は新たに有限の寿命を持つ準安定状態に対するVQEの開発にも着手した。複素数ポテンシャルをハミルトニアンに導入することで準安定状態の計算は可能となるが、ハミルトニアンがエルミートでなくなるため通常のVQEが機能しない。そこで、コスト関数としてエネルギーではなく、分散を用いる方法に切り替えることで、この問題を回避した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Keisuke Fujii, Kosuke Mitarai, Wataru Mizukami, and Yuya O. Nakagawa, “Deep Variational Quantum Eigensolver: a divide-and-conquer method for solving a larger problem with smaller size quantum computers”, arXiv:2007.10917
- 2) Nobuyuki Yoshioka, Yuya O. Nakagawa, Yu-ya Ohnishi, and Wataru Mizukami, “Variational Quantum Simulation for Periodic Materials”, arXiv:2008.09492
- 3) Wataru Mizukami, Kosuke Mitarai, Yuya O. Nakagawa, Takahiro Yamamoto, Tennin Yan, and Yu-ya Ohnishi, “Orbital optimized unitary coupled cluster theory for quantum computer”, Phys. Rev. Research 2, 033421 (2020)
- 4) Nobuyuki Yoshioka, Wataru Mizukami, and Franco Nori, “Neural-Network Quantum States for the Electronic Structure of Real Solids”, arXiv:2010.01358
- 5) Kosuke Mitarai, Yasunari Suzuki, Wataru Mizukami, Yuya O. Nakagawa, and Keisuke Fujii, “Quadratic Clifford expansion for efficient benchmarking and initialization of variational quantum algorithms”, arXiv:2011.09927