

革新的な量子情報処理技術基盤の創出  
2020 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書
------------------

土持 崇嗣

神戸大学 大学院システム情報学研究科  
准教授

多様な電子状態計算を実現する包括的量子アルゴリズムの開発

## § 1. 研究成果の概要

本年度は、変分量子回路をアダプティブに選択し段階的に構築していくアルゴリズムの問題点を解析し、強電子相関系における回路収束悪化が、各選択回路におけるスピン対称性の破れに大きく由来することを明らかにした。本研究ではスピン射影回路を導入し、強電子相関の記述に必要な複雑なゲート操作を単純な観測に置き換えることで、従来に比べて大幅な回路短縮に成功した。また、フェルミオン系でスピン対称性の破れを緩和するために必要となる相補的なスピンによる複数の励起は重複した効果を持ち量子回路を不要に長くすることが知られているが、スピン射影の導入によってこの点についても大きな改善を得た。こうして得られた量子回路に対して、エネルギー微分を求めることで、物性値の正確な予言も可能にした。

縮退した励起状態のための量子アルゴリズムとして、Jeziorski-Monkhorst 型及び内部縮約多参照型(スピンプリー型を含む)のユニタリ結合クラスタ量子回路についてシミュレータを実装し、これらの回路深度と精度について検証した。一般的に用いられる変分量子デフレーション法では基底状態の記述が近似的である場合、励起状態の記述が劣悪になるが、本提案手法はどちらも励起状態が大きく改善され、特に円錐交差について精度良く得られることを明らかにした。量子虚時間発展法において、古典演算に置いて指数関数的なコスト増加を回避する手法を提案するなど、様々な改良を提案した。また、各虚時間ステップ状態を Krylov 基底とした QLanczos 法では励起状態が正しく記述できないことを実証した。

さらに、多体展開によって定量的な相関効果を取り入れる手法の基盤を構築した。いくつかの小さな分子において、ユニタリ結合クラスタと多体展開法を組み合わせることで、現在では取り扱えない大きな基底関数を用いて精度良く計算できることが明らかになった。