

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

2021 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計算手法・量子アルゴリズムの開発を進めている。2021 年度には量子コンピュータを用いて任意の電子状態間のエネルギー差を直接計算することができる新規手法である量子位相差推定アルゴリズムを開発した。量子位相差推定ではエネルギー差を求めたい 2 つの電子状態の波動関数の量子重ね合わせ状態を利用することで、1 回の全エネルギー計算と同等の計算コストでエネルギー差の直接計算を可能にした。2020 年度にはスピン状態が異なる電子状態間のエネルギー差を直接計算できる量子アルゴリズム BxB を開発していたが、量子位相差推定アルゴリズムは BxB アルゴリズムよりも実装に必要な量子ビット数が半分程度となる、BxB アルゴリズムでは不可能だったスピン量子数が同じ電子状態間のエネルギー差も計算できるなど、より汎用性の高い量子アルゴリズムとなっている。さらに量子位相差推定アルゴリズムを応用し、計算対象の電子状態と、電子が 0 個の真空状態の波動関数の量子重ね合わせ状態を利用することで、従来の量子位相推定に基づく手法では必須であった制御-時間発展演算が不要な full-CI 計算手法を開発した。また、前年度に引き続き、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について系統的な探索を行った。

【代表的な原著論文情報】

- 1) [K. Sugisaki](#), C. Sakai, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, “Bayesian phase difference estimation: a general quantum algorithm for the direct calculation of energy gaps”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2021**, *23*, 20152–20162. (DOI: 10.1039/D1CP03156B)
- 2) [K. Sugisaki](#), C. Sakai, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, “Quantum algorithm for full configuration interaction calculations without controlled time evolutions”, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **2021**, *12*, 11085–11089. (DOI: 10.1021/acs.jpcllett.1c03214)
- 3) [K. Sugisaki](#), T. Kato, Y. Minato, K. Okuwaki, Y. Mochizuki, “Variational quantum eigensolver simulations with the multireference unitary coupled cluster ansatz: a case study of the C_{2v} quasi-reaction pathway of beryllium insertion into a H_2 molecule”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2022**, *24*, 8439–8452. (DOI: 10.1039/D1CP04318H)