

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

倉重 佑輝

京都大学 大学院理学研究科
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き求めた電子波動関数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ための量子-古典空間分離法の構築のために、前年度に開発した量子表現空間における波動関数から得られる縮約密度行列やエネルギー期待値を、量子シミュレータではしばしば用いられるが量子コンピュータ上では実行不可能な量子状態に対する任意のエルミート演算子の期待値を内積計算から求めるのではなく、実際の量子コンピュータでの測定による期待値評価を想定したサンプリング手法による期待値の統計的推定手法の実装を行った。本研究課題で採用する量子固有値ソルバーの変分量子固有値解法は量子位相推定が要求精度 ϵ に対する必要観測回数が $O(\epsilon^{-1})$ に比例して増加するのに対し、 $O(\epsilon^{-2})$ に比例して増大する。量子化学計算の結果として求めるべき電子ハミルトニアンエネルギー期待値や縮約密度行列は第二量子化の基本演算子の積和として表され、和の各項は可換ではなく同時観測が困難であることから、項別に新たな量子回路を付加してパウリ Z 演算子の固有状態として測定可能になるような実装を行い、エネルギー期待値が内積計算による厳密な値をサンプリングからも再現できることを確認した。実際に、炭素 π 共役分子系のブタジエン分子(8 量子ビット)、ヘキサトリエン分子(12 量子ビット)などのオリゴアセン系分子を対象に開発したアルゴリズムを適用し、測定サンプリング誤差を定量的に見積ることに成功した。その結果、化学現象を定量的に議論するために必要な精度、化学的精度($\sim 0.1\text{eV}$)に標準偏差 1σ を収めるためには少なくとも 10,000 回を超える測定が各項のパウリ積に対して必要となることが分かった。