

革新的な量子情報処理技術基盤の創出
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

大戸 達彦

大阪大学 大学院基礎工学研究科
助教

第一原理計算と量子アルゴリズムをつなぐ多階層計算手法の開発

§ 1. 研究成果の概要

量子コンピュータ上で第一原理計算分子動力学シミュレーションを実行するための基礎技術を確立すべく、水の計算に取り組んだ。変分量子固有値ソルバー(VQE)を用いて一つの水分子のエネルギーと力を求め、周囲の水分子の影響を古典力場の形で取り込み VQE-MM の計算をスタートしている。赤外吸収スペクトルなどの物理量を計算できるほどのトラジェクトリが蓄積されるには時間を要するため、現状では分子動力学シミュレーションを進めながらも、少しでも全体の実行時間を軽くするための工夫を行っている。将来的に量子コンピュータの実機で計算する際、計算時間をわずかでも抑えることは非常に重要となるためである。具体的には、前ステップの VQE 変分パラメータを次のステップに渡す方法の中で、良いものがないか試行錯誤中である。

また、量子アルゴリズムの正当性をテストするためのモデル分子にとどまらず、最先端の研究対象となる分子の電子状態を量子コンピュータ(のエミュレータ)で解き、量子アルゴリズムの応用可能性を探った。ピラジカル状態が安定となる多環芳香族炭化水素分子について、一重項と三重項のどちらが安定なのか、ハバードモデルを解くことで解析を行った。この分子を第一原理計算でそのまま解こうとすると、占有軌道数が 132 に達するため、現状では 14 軌道までしか解くことができない VQE では処理することができない。ハバードモデルに落とし込むと、占有軌道数が 21 まで低下するとともに、計算精度を左右する基底関数の選択の問題から回避されるという利点もある。一般的に多環芳香族炭化水素のハバードモデルによる解析は平均場近似で行われているが、本研究では CCSD、CASSCF に加えて VQE-UCCSD を用いて一重項と三重項のエネルギー差を求めた。VQE-UCCSD は、CCSD よりも CASSCF に近い結果を出すことが明らかとなった。