

革新的な量子情報処理技術基盤の創出  
2021 年度採択研究代表者

2022 年度  
年次報告書

大戸 達彦

名古屋大学 大学院工学研究科  
准教授

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

## 研究成果の概要

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。高いビラジカル性を持つ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。いずれの方法でも一重項と三重項のエネルギーは縮退しており、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。この結果は最終的に電子スピン共鳴(ESR)や紫外-可視吸収等の実験結果と一致し、出版に至った。

そのほか、界面の水の誘電率を表面選択的な分光スペクトルのシミュレーションから推定する試みに関する論文<sup>2)</sup>、分子デバイスにおいてこれまで異なるモデルで議論されてきたトンネル領域とホッピング領域を同時に記述するモデルから伝導現象遷移領域での熱起電力を求めて実験とともに議論した論文<sup>3)</sup>、9つの元素を含む高エントロピー合金に対して初の第一原理分子動力学計算と機械学習力場の構築を試みた論文<sup>4)</sup>が出版された。より高い水分解活性を発揮する合金の組成の探索が今後の課題となるが、量子アルゴリズムを利用して探索を加速できないか検討を開始している。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) “6,6'-Biindeno[1,2-b]anthracene: An Open-Shell Biaryl with High Diradical Character”, *J. Am. Chem. Soc.* **145**, 3891 (2023).
- 2) “The dielectric function profile across the water interface through surface-specific vibrational spectroscopy and simulations”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **119**, e2204156119 (2022).
- 3) “Thermopower in Transition from Tunneling to Hopping”, *Nano Lett.* **22**, 7682 (2022).
- 4) “Corrosion-resistant and high-entropic non-noble-metal electrodes for oxygen evolution in acidic media”, *Adv. Mater.* **35**, 2207466 (2023).