

2021年3月17日
大阪市立大学
科学技術振興機構

化学研究に役に立つ量子アルゴリズム

原子・分子のイオン化エネルギーを量子コンピュータで 直接計算する手法を開発！

<本研究のポイント>

- ◇ 量子コンピュータは量子化学計算を高速に実行できるが、エネルギー計算値の誤差と計算コストが反比例する。
- ◇ 分子のエネルギーではなく、エネルギー差を直接計算する量子アルゴリズムを開発することで、大きな分子の量子化学計算も低い計算コストで実行できる。
- ◇ 原子・分子の基本的性質の1つであるイオン化エネルギーを直接計算する手法を提案した。

<概要>

大阪市立大学大学院 理学研究科の杉崎 研司（すぎさき けんじ）特任講師、佐藤 和信（さとう かずのぶ）教授、工位 武治（たくい たけじ）名誉教授らの研究チームは、量子コンピュータを用いてスピン量子数が異なる電子状態（スピン状態）間のエネルギー差を直接計算できる量子アルゴリズムを改良し、量子コンピュータ実機に実装しやすくとともに、中性原子・分子が電子を放出してイオンとなるために必要なエネルギーであるイオン化エネルギーの直接計算へと応用しました。これらの結果は、化学で興味を持たれている大きな分子の量子化学計算を量子コンピュータで効率的に実行するための重要な道筋を示すものといえます。

本研究成果は国際学術誌『The Journal of Physical Chemistry Letters』に2021年3月16日（火）20時（日本時間）にオンライン掲載されました。

<掲載誌情報>

雑誌名：The Journal of Physical Chemistry Letters (IF: 6.71)

論文名：Quantum algorithm for the direct calculations of vertical ionization energies

著者：Kenji Sugisaki, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Takeji Takui

掲載 URL: <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c00283>

<研究背景>

近年、特定の問題をスパコンなどのコンピュータよりも高速に解くことができる量子コンピュータの研究が非常に盛んに行われています。そのなかでも原子・分子のエネルギーを理論的に求め、電子状態を明らかにする量子化学計算は量子コンピュータの近い将来の計算ターゲットとして特に注目されています。しかし、量子コンピュータを用いた量子化学計算ではエネルギー計算値の誤差に反比例して計算コストが増えてしまうため、原子・分子のエネルギーを小さな桁まで正確に決定するのが非常に大変です。そのため、このままでは化学で興味を持たれているような大きな分子のエネルギーを量子コンピュータを用いて正確に決定し、量子コンピュータを化学研究に役立てることが困難です。

ところで、ほぼ全ての化学の問題は分子の全エネルギーそのものではなく、エネルギー差を議



論します。また、分子が大きくなったり、周期表で下の方に現れる重原子が入ったりすると全エネルギーは大きくなりますが、議論したいエネルギー差の大きさは分子サイズにかかわらずほぼ一定という特徴があります。同研究グループは、全エネルギーではなくエネルギー差を量子コンピュータで直接計算することができれば上述した問題が解決でき、量子コンピュータを実際の化学研究に役立てられる未来を創造できると考え、研究を進めています。

<研究内容>

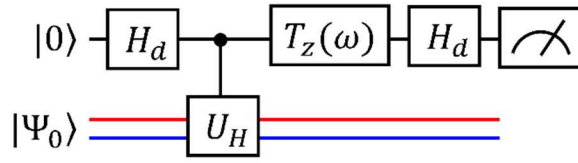
同研究グループは最近、スピン量子数^{*1}が異なる電子状態（スピン状態）間のエネルギー差を直接計算することができる量子アルゴリズムを開発しました（K. Sugisaki, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 2121–2132.）。この量子アルゴリズムはこれまで知られていた量子位相推定^{*2}と呼ばれる量子アルゴリズムよりも量子論理回路（量子サーキット）が短く、量子コンピュータへの実装が容易ですが、必要な量子ビット数が量子位相推定の2倍程度に増えてしまうという欠点がありました。今回、同研究グループは次ページの図のように量子論理回路の改良を行い、実装に必要な量子ビット数を量子位相推定と同程度まで削減することに成功しました。また、この量子アルゴリズムを原子・分子が電子を放出してイオンとなるために必要なエネルギーであるイオン化エネルギーの直接計算へと応用しました。イオン化エネルギーは原子・分子の最も基本的な物性値の1つであり、化学結合の強さや性質、化学反応を理解するための重要な指標にもなります。従来はイオン化エネルギーを求めるには中性状態とイオン化状態それぞれのエネルギーを計算する必要がありましたが、この量子アルゴリズムを使えばイオン化エネルギーを一回の計算で求めることができます。量子論理回路の数値シミュレーションから、イオン化エネルギー計算値の読み出しにかかる計算コストは原子番号や分子サイズに依存せず一定となること、量子論理回路の長さが量子位相推定の10分の1以下でイオン化エネルギーを0.1 eVの高精度で求められることを明らかにしました。

<今後の展開と応用について>

これまでに報告されている量子化学計算のための量子アルゴリズムのほとんどは、全エネルギーを求めるように設計されているため、化学で興味を持たれているような大きな分子の、小さなエネルギー差を正確に求めることが困難でした。本研究で開発した手法はエネルギー差を直接計算できるので、大きな分子の計算が格段に容易になります。

本研究で提案した手法は従来のコンピュータに対して計算速度の指数関数的な加速が保証されています。現在利用可能な量子コンピュータはノイズの影響が大きく、長い量子論理回路を正確に実行することが困難ですが、量子コンピュータハードウェアの発展により、従来のコンピュータでは現実時間内に計算ができないような大きな分子の高精度計算が本量子アルゴリズムを用いて実行できるようになると期待されます。

反復的量子位相推定(従来法)の量子論理回路

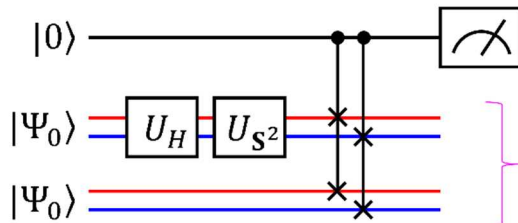


$$U_H = \exp(-iHt)$$

赤色と青色の横線はそれぞれ、開殻分子軌道と閉殻分子軌道の占有数を保存した量子ビット群

U_H は赤色と青色の横線で示した量子ビット群の両方に作用する

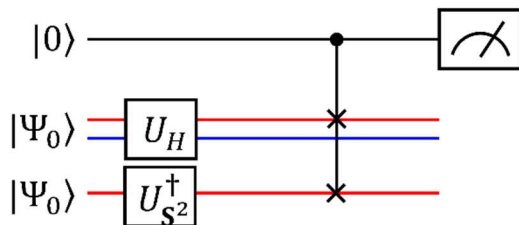
エネルギー差直接計算のための量子論理回路(先行研究で開発したもの)



$$U_{S^2} = \exp(-ijS^2t)$$

従来法の約2倍の数の量子ビットが必要

本研究で改良を行った量子論理回路



U_{S^2} が作用するのは赤色の横線で示した開殻分子軌道の占有数を保持した量子ビット群だけなので、 U_{S^2} ゲートの位置を変えることで、青色で示した量子ビット群を削除できる

赤色の量子ビット群の数は
青色の量子ビット群の数よりも
格段に少ない

<用語>

*1 スピン量子数…電子のスピン角運動量の大きさを特徴づける量子数であり、1つの電子はスピン量子数 $S=1/2$ を持つ。一般に分子は複数の電子をもつので、分子のスピン量子数 S はゼロおよび正の整数または半整数となる ($S=0, 1/2, 1, 3/2, \dots$)。分子内では一般に2つの電子はペア(電子対)を作って安定化し、基底状態のスピン量子数は $S=0$ (スピン一重項状態と呼ぶ) となることが多いが、分子内に不対電子と呼ばれる電子対を作っていない電子を持つ分子ではスピン量子数 S が0ではない電子状態が基底状態となる、あるいは基底状態のエネルギー的近傍に現れる。

*2 量子位相推定…量子コンピュータを用いて、波動関数の時間発展演算子などのユニタリー演算子の固有値を古典コンピュータよりも指数関数的に速く計算できる量子アルゴリズム。量子化学計算だけでなく、線形方程式を解く量子アルゴリズムなど、様々な問題に応用されている。

<資金・共同研究者・特許等について>

本研究は、AOARD Scientific Project on “Molecular Spins for Quantum Technologies” (Award No. FA2386-17-1-4040, 4041), JSPS 科研費基盤研究 C (18K03465)、科学技術振興機構 (JST) 戦略的創造研究推進事業さきがけ「量子化学計算の高効率量子アルゴリズムの開発」(JPMJPR1914)の対象研究です。



【研究内容に関するお問い合わせ】

大阪市立大学 大学院理学研究科 物質分子系専攻 杉崎 研司 (すぎさき けんじ)

TEL : 06-6605-2555 E-mail : sugisaki[at]sci.osaka-cu.ac.jp

または、工位 武治 (たくい たけじ)

TEL : 06-6605-2605 E-mail: takui[at]sci.osaka-cu.ac.jp

【本件に関するお問い合わせ】

大阪市立大学 広報課 担当：西前

TEL : 06-6605-3411 E-mail : t-koho[at]ado.osaka-cu.ac.jp

【JSTの事業に関するお問い合わせ】

科学技術振興機構 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ

嶋林 ゆう子 (しまばやし ゆうこ)

TEL : 03-3512-3526 FAX : 03-3222-2066 E-mail : presto[at]jst.go.jp

【報道担当】

科学技術振興機構 広報課

TEL : 03-5214-8404 FAX : 03-5214-8432 E-mail : jstkoho[at]jst.go.jp