

2022年11月29日

大阪公立大学

科学技術振興機構 (JST)

エネルギー微分を直接計算し分子構造最適化を実現

～量子コンピュータによる化学計算の社会応用へ大きな一歩～

<ポイント>

◇量子コンピュータを活用し、有限差分法^{*1}による微分値を 1回の計算から直接求めるための具体的な量子論理回路を初めて明らかに。

◇今後、さまざまな分子物性の精密計算が量子コンピュータ上で可能となることを示唆。

<概要>

大阪公立大学大学院 理学研究科の杉崎 研司(すぎさき けんじ) 特任講師(科学技術振興機構・さきがけ専任研究者)、佐藤 和信(さとう かずのぶ) 教授、工位 武治(たくい たけじ) 大阪市立大学名誉教授らの研究チームは、量子コンピュータを用いて、有限差分法による微分値を1回の計算から直接求めるための量子論理回路を導出し、分子の最安定な立体構造を求める分子構造最適化へと応用しました。

有限差分法で一変数関数の微分計算を行うには、古典コンピュータでは少なくとも2回の関数値の計算が必要となります。これに対し、量子コンピュータを使えば有限差分法での微分を1回の計算から求められることが先行研究で示されていますが、微分計算を行うための具体的な量子回路は導出されていませんでした。本研究グループは、以前に開発した量子位相差推定アルゴリズム^{*2}で用いる量子論理回路を改良することにより、微分計算のための量子論理回路の導出に成功しました。

本研究成果は、国際学術誌『The Journal of Physical Chemistry Letters』に2022年11月29日(火)(日本時間)にオンライン掲載予定です。

今回の成果は「量子重ね合わせ」を上手に使うことにより、原子核をどの方向に動かせばエネルギーが下がるか、すなわちエネルギーの核座標微分を量子コンピュータ上で効率的に計算できることを示すもので、量子コンピュータの化学応用に向けた大きな一歩と言えると思います。



杉崎 研司 特任講師

<研究の背景>

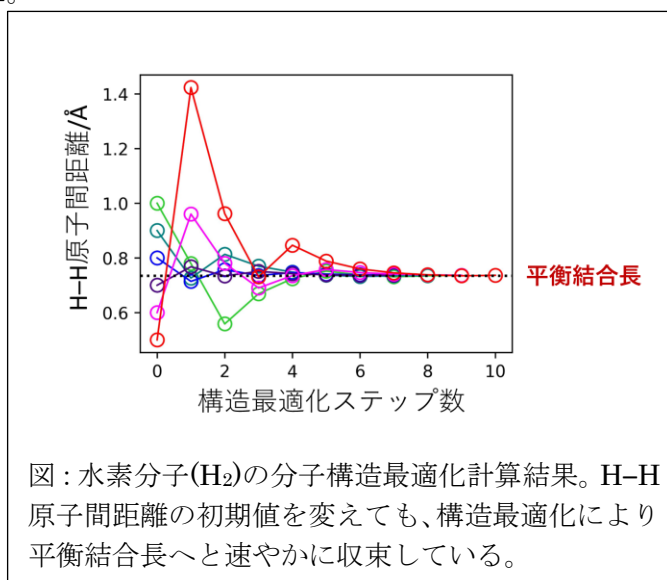
近年、量子コンピュータに関する研究開発が非常に注目を集めています。量子コンピュータは暗号に利用する大きな桁数の素因数分解など、スパコンなどの古典コンピュータでは「問題サイズ」に対して指数関数的に計算時間が増えてしまう特定の課題を、多項式時間で解くことを可能にすることが知られています。そのため、原子・分子のシュレーディンガー方程式^{*3}を近似的に解き、電子状態を明らかにする量子化学計算は、量子コンピュータの計算ターゲットと考えられています。

分子の反応性や物性は分子構造に依存し、立体構造が異なれば、分子物性も異なることがあります。分子の最安定な立体構造を求める分子構造最適化手法の開発は、量子化学計算を化学の研究開発に役立てるために必要不可欠です。分子構造を最適化するには、原子核をどちらに動かせばエネルギーが下がり安定化するか、すなわちエネルギーの核座標微分を計算しなければなりません。量子コンピュータでの精密量子化学計算手法として期待されている量子位相推定アルゴリズムでは、エネルギーの核座標微分は有限差分法を用いて数値的に計算する必要があります。有限差分法によるエネルギーの核座標微分は、二原子分子のように分子構造パラメータが1つの場合、古典コンピュータでは少なくとも2回の全エネルギー計算が必要となるのに対し、量子コンピュータではたった1回の計算で求められると2009年に報告されています (I. Kassal, A. Aspuru-Guzik, *J. Chem. Phys.* **2009**, *131*, 224102.)。しかし、この先行研究では、微分計算のための量子論理回路の具体的な構築方法が議論されておらず、この微分計算を具体的に量子コンピュータ上にどのように実装するかが課題でした。

<研究の内容>

本研究グループは2021年に、個々の電子状態の全エネルギーを求めることなく、エネルギー差を直接計算できる量子位相差推定アルゴリズムを開発しています (K. Sugisaki et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 20152–20162.)。量子位相差推定アルゴリズムは、これまで同じ分子構造での異なる電子状態間のエネルギー差にしか適用できませんでした。今回、本研究グループは、異なる分子構造間でのエネルギー差の直接計算が可能となるように量子位相差推定アルゴリズムを拡張することに成功しました。これにより、有限差分法でのエネルギー核座標微分が1回の計算から求められるようになりました。

さらに本研究グループは、開発したエネルギー核座標微分計算手法を、水素分子(H₂)、水素化リチウム(LiH)、水素化ベリリウム(BeH₂)、窒素分子(N₂)の分子構造最適化計算へと適用しました。代表的な例として、水素分子での分子構造最適化結果(右図)では、H-H原子間距離の初期値をさまざまに変化させて計算を行った結果、どの原子間距離から計算をスタートしても10ステップ以内に、最もエネルギーが低く、安定な構造である平衡結合長へと速やかに収束することが明らかとなりました。また、分子の構造自由度の違いに応じて、どのように量子論理回路を組み立てればよいかについても議論しました。



図：水素分子(H₂)の分子構造最適化計算結果。H-H原子間距離の初期値を変えても、構造最適化により平衡結合長へと速やかに収束している。

<期待される効果・今後の展開>

精密な量子化学計算は、創薬や材料開発などさまざまな関連分野でも非常に重要な役割を担っていますが、これらの研究開発に量子化学計算を役立てるためには分子構造最適化手法の開発が必要不可欠です。本研究成果により、量子コンピュータによる量子化学計算の実社会問題への応用にまた一歩近づいたと言えます。また、エネルギーの微分は、分子構造最適化だけでなく、さまざまな分子物性値計算にも使われていることから、本手法を応用することにより、分子物性の精密計算が量子コンピュータ上で可能となることも期待できます。

<資金情報>

本研究は、JST 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)、JSPS 科研費基盤研究 C (21K03407)の対象研究です。

<用語解説>

※1 **有限差分法** …関数の微分値を数値的に計算する手法。一変数関数 $f(x)$ の場合には以下の式を用いて微分値を計算するため、 $x + \Delta x/2$ および $x - \Delta x/2$ という 2 つの座標での関数値を計算する必要がある。 d 個の変数を持つ多変数関数 $f(x_1, x_2, \dots, x_d)$ の場合には少なくとも $(d + 1)$ 回の関数値計算が必要となる。

$$f'(x) = \frac{f(x+\Delta x/2)-f(x-\Delta x/2)}{\Delta x}$$

※2 **量子位相推定アルゴリズム** … 量子コンピュータを用いて、波動関数が時間とともにどのように変化するかを記述する時間発展演算子など、固有値の絶対値が 1 である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、さまざまな問題に応用されている。

※3 **シュレーディンガー方程式** … 量子力学的な状態を表す波動関数の時間的変化を規定する微分方程式で、量子力学の基礎となるもの。

<掲載誌情報>

【発表雑誌】 The Journal of Physical Chemistry Letters

【論文名】 Quantum Algorithm for Numerical Energy Gradient Calculations at the Full Configuration Interaction Level of Theory

【著者】 Kenji Sugisaki, Hiroyuki Wakimoto, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, and Takeji Takui

【掲載 URL】 <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.2c02737>

【研究内容に関する問い合わせ先】

大阪公立大学大学院 理学研究科
特任講師：杉崎 研司 (すぎさき けんじ)
TEL : 06-6605-2555
E-mail : sugisaki[at]omu.ac.jp
または、
大阪市立大学名誉教授：工位 武治 (たくい たけじ)
TEL : 06-6605-2605
E-mail : takui[at]omu.ac.jp

【報道に関する問い合わせ先】

大阪公立大学 広報課 國田 (くにだ)
TEL : 06-6605-3411
E-mail : koho-list[at]ml.omu.ac.jp

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

【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