

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 量子化学計算の高効率量子アルゴリズムの開発

2. 個人研究者名

杉崎 研司（大阪公立大学大学院理学研究科 特任講師）

3. 事後評価結果

本研究は量子コンピュータを用いて、従来の計算手法では高精度量子化学計算が不可能な複雑な分子系あるいは巨大分子系を効率的に取り扱うことができる手法を開発することを目的としている。具体的には擬縮退系に対する誤り耐性量子コンピュータの活用を念頭に、近似波動関数の生成とエネルギー固有値を読み出す量子位相推定アルゴリズムの改良を行った。

擬縮退系では電子スピン量子数 S が異なる電子状態が基底状態近傍に多数存在するが、これらの状態が波動関数に混入すると正しい化学反応性や分子物性が得られないという問題があった。このスピン汚染を除去する方法として確率的スピン射影法を開発した。また、量子化学において重要となる、基底状態と励起状態間のエネルギーの差を直接求める量子アルゴリズムを開発した。このアルゴリズムは基底状態と励起状態の重ね合わせを用いて量子位相差を推定するものであり、本研究期間中に有限差分法によるエネルギー数値微分および分子構造最適化問題や相対論的量子計算への適用も行われた。量子位相推定アルゴリズムでは計算に用いる近似波動関数が真の波動関数との重なりが大きいことが要求される。本研究ではそのために断熱量子計算の原理を用いる断熱状態生成法について良い近似波動関数を得るための計算条件を検討し、有益な知見を得ている。これらの成果から、本研究の目的は達成されたといえる。海外の研究動向に対しては、検討する量子化学計算手法を変えるなど柔軟に対処している。

本研究者は期間中に量子化学計算の教科書を出版した。また、プレスリリースによる研究成果の発信を積極的に行った。このような活動は量子化学分野において量子コンピュータ活用に関する問題意識や存在感を高めることに寄与していることは特筆できる。また、世界的に高く評価されている学術誌にも成果が複数掲載されている。

研究の本筋とは異なるが、本さきがけ領域の研究者と共同して量子アニーリングを用いて励起エネルギーを直接計算する方法を提案した。この共同研究は量子化学者と量子情報技術の研究者との協働によるもので、本さきがけ研究の効果といえる。

本研究は誤り耐性量子コンピュータを利用する量子化学計算手法を開発しているため、直ちに NISQ 量子コンピュータで活用されるものではないが、誤り耐性量子コンピュータが実現された際の計算の効率化手法として有用であることが期待される。今後、本研究で開発された量子アルゴリズムを発展させて適用範囲、利便性、効率などを向上していくことが望まれる。同時に、小規模な分子系を対象としたシミュレーションや NISQ による計算によって開発された手法の有効性が実証されていくことを期待する。さらに、シミュレーション結果などをスケールアップすることでターゲットとする複雑な電子状態を持つ分子系について、他の手法とのベンチマークを行い、効率などの比較により本手法の利点を明確にしていくことが本手法の普及に重要であると思われる。