



## 量子化学を量子コンピュータで解く量子アルゴリズムの開発 分子の電子構造・化学反応解明のための 量子論理回路の並列化・超高速化に初めて成功

### <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）特任教授らの研究チームは、分子内に電子対を作っていない電子（不對電子という）をもつような開殻分子系について、従来型の最新のコンピュータでは天文学的時間がかかる（指数関数爆発という）全配置間相互作用電子状態計算を量子コンピュータ上で実行できる超高速量子アルゴリズムを開発しました。エネルギーが最も低い電子状態である基底状態が高い確率で得られるような良い近似波動関数である配置状態関数を生成する並列化量子回路を見出し、従来不可能とされてきた量子化学計算の超高速化に成功しました。

本研究成果は、国際学術誌 *Chemical Physics Letters: X* の創刊号に、2018年12月13日（米国東部時間）に掲載されました。

### <掲載誌情報>

雑誌名：Chemical Physics Letters: X

論文名：Open shell electronic state calculations on quantum computers: A quantum circuit for the preparation of configuration state functions based on Serber construction

著者：Kenji Sugisaki, Satoru Yamamoto, Shigeaki Nakazawa, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Takeji Takui

掲載 URL：<https://doi.org/10.1016/j.cpletx.2018.100002>

### <研究背景>

近年、スーパーコンピュータを含めた従来型のコンピュータ（古典コンピュータ）を凌駕する性能を持つ量子コンピュータの研究が、先進国の国策プロジェクトとして国内外で盛んに行われています。量子コンピュータは、量子力学法則を動作原理とするコンピュータで、通信暗号に使われている巨大な数の素因数分解や巡回セールスマン問題などを超高速に解くことができることが知られています。

原子及び分子の物理的・化学的性質を支配する Schrödinger 方程式を正確に解くことは、化学・物理分野における究極目標の1つです。Schrödinger 方程式は、量子力学の第一原理と言われ、これを厳密に解き、電子のような微視的粒子のどのような情報でも引き出せる関数である波動関数を求めることができれば、分子構造、化学反応経路、分光学的性質、分子物性等を正確に予測することができます。しかしながら、一、二電子系など特殊な場合を除き、今日まで大きな分子などの多電子系の Schrödinger 方程式の厳密解は得ることができず、さまざまな数学的近似法が開発されてきました。それらの中でも、すべての電子がとりうるすべての配置を考慮する全配置間相互作用法（full configuration interaction 法; full-CI 法）は、Schrödinger 方程式の最適解を与えることができると考えられています。

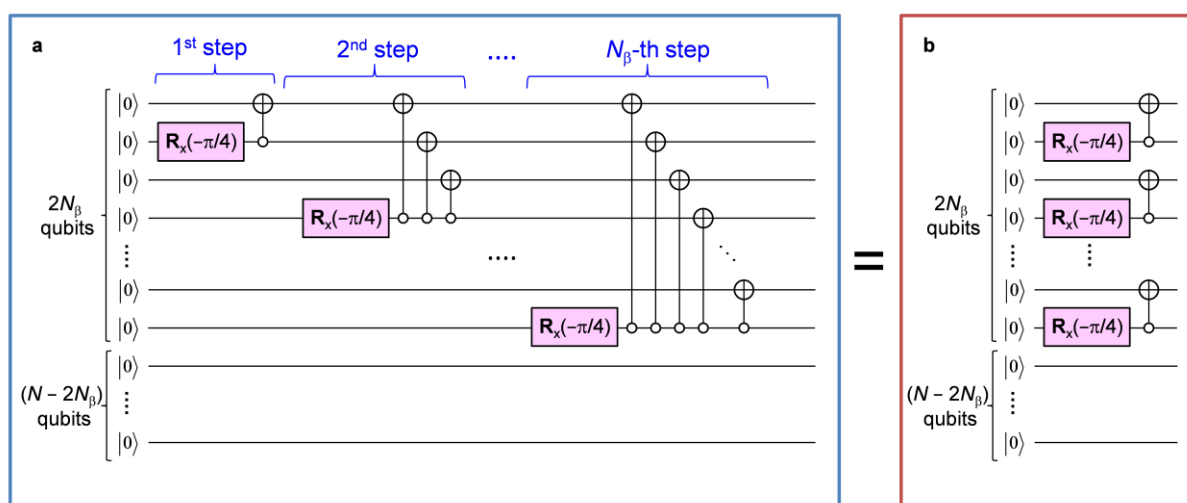
full-CI 計算法は、古典コンピュータを使うと計算時間が分子サイズに対して指数関数的に増加しますが、量子コンピュータを使えば現実時間内に計算が可能な量子アルゴリズムが提案されています。しかし、量子コンピュータを使った full-CI 計算で正しい答えを得るためには、

Schrödinger 方程式の解である波動関数とよく似た、良い近似波動関数を準備する必要があります。近似波動関数が Schrödinger 方程式の解である波動関数と酷似していれば 1 回で正しい解が得られますが、近似波動関数の精度が悪いと、正しい計算結果が得られるまで繰り返し計算を行う必要があります。量子コンピュータを使うことによる計算高速化のメリットが失われてしまいます。

本学の研究グループは 2016 年に、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もつ開殻分子の電子状態を量子コンピュータで解く際に、配置状態関数と呼ばれる近似波動関数を用いたとき、エネルギーが最も低い状態である基底状態を得る確率が大幅に改善されることを見出し、配置状態関数を量子コンピュータ上で効率的に生成する量子論理回路を初めて開発しました (K. Sugisaki, S. Yamamoto, S. Nakazawa, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, *J. Phys. Chem. A* **2016**, *120*, 6459-6466. DOI: 10.1021/acs.jpca.6b04932)。しかし、先に開発した量子論理回路は不対電子数が多くなったときに計算時間が長くなること、実在の量子コンピュータデバイスに実装するとき追加の量子操作が必要になること、並列化ができないことなどの問題点が残されていました。今回、これらの問題点を解決して並列化量子論理回路の実装を可能にする量子アルゴリズムを開発し、分子サイズの大きな系の電子状態解析にも適用できることを示しました。

### <研究内容>

同研究グループが 2016 年に発表した配置状態関数を生成する量子回路は、量子力学で知られた角運動量の合成則に従って、電子スピン角運動量を 1 つずつ合成していくという手法をとっており、分子が持つ不対電子のうち、下向きスピン ( $\beta$  スピン) をとっている電子数を  $N_\beta$  とすると、 $N_\beta^2$  回程度の量子ゲート操作が必要でした。今回の研究では、1934 年に Serber が提案した、ジェミナルスピン関数と呼ばれる 2 電子スピン系の関数を配置状態関数生成の基本単位として用い、電子スピン角運動量を 2 つずつ合成していく手法 (Serber 構築法) に注目し、Serber 構築法に基づいて量子コンピュータ上に配置状態関数を生成することができる新規な量子回路を開発しました。下図には、以前に開発した量子回路 (左側青枠内) と、今回開発した Serber 構築法に基づく量子回路 (右側赤枠内) を載せていますが、配置状態関数生成に必要な量子ゲート操作回数が従来の量子回路では  $N_\beta + N_\beta^2$  回だったのに対し、今回開発した量子回路では  $2N_\beta$  回と大幅に削減されています。また、今回開発した量子回路は  $N_\beta$  個に並列化ができ、電子スピン数に関わらず一定の演算時間で実行することが可能になりました。量子コンピュータのメリットを發揮させる、実用性の高い、量子化学計算用の量子アルゴリズムの初めての例となります。



図：(左) 以前に開発した配置状態関数を生成する量子論理回路。(右) 今回開発した Serber 構築法に基づき配置状態関数を生成する量子論理回路。回路 (右) の複雑さが極端に減少していることが分かる。

### <今後の展開と応用について>

開殻分子の量子化学計算は、光合成メカニズムなど化学反応・触媒反応機構の解明、単分子メモリへの応用が期待されている単分子磁石など新奇な分子デバイスの理論設計などに必要不可欠です。今回の研究で、量子コンピュータを用いた開殻分子の量子化学計算に適した近似波動関数を、電子スピン数にかかわらず一定の量子ゲート操作時間で高速に準備することが可能となり、より大きな実在分子系への適用が容易になりました。また、量子コンピュータを用いて波動関数の近似精度を上げるためにこれまで、断熱的状态生成法 (Adiabatic state preparation 法; ASP 法) や、適応サンプリング配置間相互作用法 (Adaptive sampling configuration interaction 法; ASCI 法) などの手法が提案されており、これらの手法を用いる際の初期波動関数として配置状態関数を用いるなど、さまざまな応用があります。

量子コンピュータを用いた量子化学計算は、量子コンピュータが従来型の古典コンピュータよりも高速で問題を解くことができること (量子優位性と呼ばれる) を実験的に立証するためのテスト・モデル系として世界中で注目を集めており、今後この分野の研究はますます盛んになると予想されます。

### <資金・共同研究者・特許等について>

本研究は、AOARD Scientific Project on “Quantum Properties of Molecular Nanomagnets” (Award No.FA2386-13-1-4029, 4030, 4031), AOARD Project on “Molecular Spins for Quantum Technologies” (Grant No. FA2386-17-1-4040), JSPS KAKENHI Grant Numbers 23350011, 17H03012, 18K03465 の対象研究です。また、Grants-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas (Quantum Cybernetics), FIRST Quantum Information Processing Project, Open Advanced Research, Facilities Initiative Program from the MEXT の一部対象研究です。

#### 【本件に関するお問合せ先】

大阪市立大学 広報室 担当：三苫（みとま）

TEL：06-6605-3410 E-mail：t-koho@ado.osaka-cu.ac.jp