

量子コンピュータによる量子化学計算#2 - 汎用性の向上 - Improvements of quantum chemical calculations with quantum computers

(株)MDR¹, 星薬科大薬², 立教大理³, 東大生産研⁴

加藤拓己¹, 奥脇弘次², 望月祐志^{3,4}, 湊雄一郎¹

MDR Inc.¹, Hoshi Univ.³, Rikkyo Univ.³, Univ. Tokyo⁴

Takumi Kato¹, Koji Okuwaki², Yuji Mochizuki^{3,4}, Yuichiro Minato¹

E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp

【序】IBM グループによる報告[1]以降、量子コンピュータ(シミュレータ含む)を用いた量子化学計算に関する研究開発が世界的に活発になってきています(Aspuru-Guzik グループによる総説[2,3]を参照)。国内でも、阪大-QunaSys、大阪府大、私達 MDR-立教大のグループなどが活動しています。私達は、2019年春期の本講演会において、化学結合論や分子軌道論などの大学科目における教育ツールとしての可能性を意識した上で、 $\{H_2, HeH^+, LiH\}$ の最小基底 STO-3G[4]による計算例を報告しました[5]。今回の発表では、凍結内殻近似による扱い、仮想軌道空間のコンパクト化などの技法を導入し、第二周期以降の分子の計算、基底関数の向上などを発表させていただきます。

【典型スキーム】与えられた分子構造で、PySCF[5]を用いて HF (Hartree-Fock)計算を行い、分子軌道と基底関数積分から分子積分を作成して第二量子化ハミルトニアン[4]を構築し、OpenFermion[6]によって BK (Bravyi-Kitaev)変換[2,3]します。その後、図1に示す VQE (Variational Quantum Eigensolver)によって UCC (Unitary Coupled Cluster)型の波動関数[2,3]を量子シミュレータ Blueqat[7]を使って求めます。

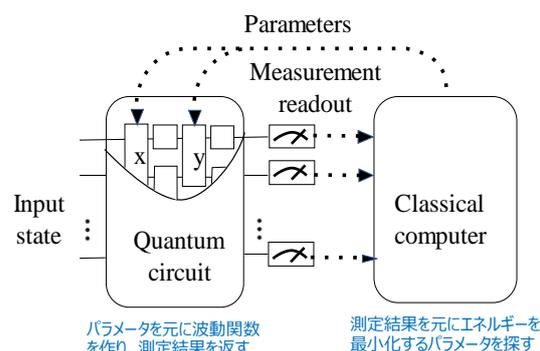


図 1. 変分的量子固有値ソルバ

【汎用性の向上】上記のスキームは最小基底では直截に適用出来ますが、結合に寄与しない内殻軌道数が多くなる場合、分割-分極型基底のように仮想軌道空間が広がる場合には難しくなります。最近、凍結内殻[8]を用いた計算例が報告されました[9]。凍結内殻では、1電子の分子積分を Fock型に転換する必要があります。もう一つ、基底の向上に伴って仮想軌道数が増えますので、MP2自然軌道[10]的なユニタリー変換によって縮減することを考えています。ワークフローとしては、第二量子化ハミルトニアンの構築時にこれらの技法を施します。実応用の例は当日お示しします。

【参考文献】 [1] Kandala et al., Nature, 549 (2017) 242. [2] Cao et al., <<https://arxiv.org/abs/1812.09976>>. [3] McArdle et al., <<https://arxiv.org/abs/1808.10402>>. [4] Szabo et al., Modern Quantum Chemistry, Macmillan (1982). [5] Sun et al., WIREs Comp. Mol. Sci. (2017) e1340. [6] <<https://github.com/quantumlib/OpenFermion>>. [7] <<https://github.com/Blueqat/Blueqat>>. [8] Hosteny et al., J. Chem. Phys. 62 (1975) 4764. [9] McCaskey et al., <<https://arxiv.org/abs/1905.01534>>. [10] Jensen et al., J. Chem. Phys. 88 (1988) 3834 & (errata) J. Chem. Phys. 89 (1988) 5354.