一般的なユニタリの線形結合のための量子回路の構成：分子の光学吸収スペクトルのシミュレーション

Construction of quantum circuit for a generic linear combination of unitaries: Simulation of optical absorption spectra of molecules

東工大，株式会社 Quemix ○小杉 太一，松下 雄一郎
Tokyo Institute of Technology, Quemix Inc., ○Taichi Kosugi, Yu-ichiro Matsushita
E-mail: kosugi.taichi@gmail.com

量子コンピュータを用いた効率的な計算として検索や因数分解が知られているが、最近は量子ハードウェアの発展により量子化学や組み合わせ最適化問題などのための実際的な使用が多方面において模索されている。これまで古典コンピュータ上での電子状態計算のために多くの知識と技術が蓄積されてきたが、それらをそのまま量子コンピュータ上で利用することは必ずしもできない。ゲート操作がユニタリであることが量子アルゴリズム開発の一つの制限である。本研究ではユニタリ演算子の線形結合として与えられた任意の非ユニタリ演算子を任意の入力状態に確率的に作用させる回路の再帰的構成法を提案する。[1]この手法は一般的なものであるため様々な量子計算において使用できる。特に量子化学の分野においては物理量を取得するために非ユニタリ演算子の行列要素を評価する必要がしばしばあるため、本手法は量子コンピュータを用いた量子化学計算に有用である。たとえば光電子分光および逆光電子分光実験により得られるスペクトルは物質科学において重要であり、ある近似においては一粒子グリーン関数(GF)であるとみなせる。[2]また線形応答関数[1]からは誘電関数、光吸収面密度、電気伝導率、磁化率といった系の外場に対する応答の情報が計算される。今回開発した量子アルゴリズムのシミュレーションをおこない、分子の（応答関数から計算される）光吸収スペクトルを計算した。本手法は、今後の量子コンピュータ上の材料計算において、物理解析の際の重要な解析手段になるものと考えられる。

参考文献

[1] T. Kosugi and Y. Matsushita, to be published in Phys. Rev. Research, arXiv: 1911.00293 (2019).
[2] T. Kosugi and Y. Matsushita, Phys. Rev. A **101**, 012330 (2020).

© 2020年 応用物理学会