量子コンピュータ上のグリーン関数・線形応答関数計算アルゴリズム

Quantum algorithms for Green's functions and linear response functions on quantum computers

東工大　°小杉 太一、松下 雄一郎

Tokyo Inst. Tech. , °Taichi Kosugi and Yu-ichiro Matsushita

E-mail: kosugi.taichi@gmail.com

近年、量子コンピュータを用いた量子化学計算が大きな注目を集めている。その報告の多くは、系の基底状態エネルギーに関する計算手法開発や計算報告であり、他の物理量に対する計算手法開発は依然未開拓領域である。今後益々、量子コンピュータによる材料計算が普及する際、量子コンピュータ上における諸物理量計算のためのアルゴリズムは重要な基幹技術になると考えられる。物理量を計算する際に重要な役割を果たすのは、グリーン関数と線形応答関数である。グリーン関数からは準粒子スペクトル（または、軌道エネルギーとも言う）が、線形応答関数からは誘電関数、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。しかし、これらを量子コンピュータ上で計算する上で課題となってくるのが、電子の生成消滅演算子の非ユニタリ性であった。量子コンピュータ上においては全ての演算はユニタリ演算と観測のみで表す必要があり、いかにして非ユニタリ演算を含むグリーン関数と線形応答関数の計算を量子コンピュータ上で実現するかは非自明な問題であった。本研究では、量子コンピュータ上においてグリーン関数と線形応答関数を計算するアルゴリズムを開発することを目的とした。

本研究では、非ユニタリ演算子に対してマヨラナ演算子の形で表現することによってユニタリ化できること、さらにはユニタリの線形結合を表す量子回路 (probabilistic state preparation)を開発することに成功した[1]。我々は、この量子回路と量子位相推定(QPE)を用いることによってグリーン関数[2]や線形応答関数[1]を計算する量子アルゴリズムを開発することに成功した。開発した量子アルゴリズムを、シミュレーションにより実際に適用を行ない、（グリーン関数から計算される）準粒子スペクトルや（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。

引用

[1] T. Kosugi and Y. Matsushita, arXiv: 1911.00293 (2019).

[2] T. Kosugi and Y. Matsushita, to be published in Phys. Rev. A, arXiv: 1908.03902 (2019).