

量子コンピュータを活用した材料設計への展望と課題

Material Design with Quantum Computers: Prospects and Challenges

株式会社 QunaSys¹ ○ 菅野 恵太¹

QunaSys Inc.¹ ○ Keita Kanno¹

E-mail: kanno@qunasys.com

1 はじめに

近年量子コンピュータハードウェアは飛躍的な進歩を遂げ、それに伴ってその活用方法を模索する研究が活発に行われている。特に、近い将来利用可能になると思われるノイズあり中規模量子 (Noisy Intermediate-Scale Quantum, NISQ) デバイス [1] の活用方法は 2010 年代中盤ごろから盛んに研究されてきた。また、ノイズの影響のない誤り耐性量子計算機 (Fault-Tolerant Quantum Computer) のためのアルゴリズムはより古く、1980 年代から研究されてきたが、近年部分的な実証実験の報告も相次いでおり、10 年程度で実用化されるという声もある。本講演では、このような量子コンピュータの発展が材料設計に貢献する可能性について、その展望と課題を議論する。

2 量子コンピュータによる材料設計

材料設計における量子コンピュータの活用には、いくつかの方向性が考えられる。最も単純かつ有望なアプローチとしては、分子系や周期系の基底状態・励起状態のエネルギーや物性値を求める際に、DFT 法や CCSD 法を使う代わりに、量子コンピューターを使うことが考えられる。重ね合わせ状態を保持できる量子コンピュータでは、電子相関を自然に表現することができ、基底・励起状態エネルギーや物性値を古典コンピュータよりも正確に計算することができる。NISQ デバイスではノイズに強い Variational Quantum Eigensolver (VQE) アルゴリズム [2] が、FTQC ではより正確な量子位相

推定 (Quantum Phase Estimation, QPE) アルゴリズム [3] が、それぞれ開発されており、精度や計算量向上、また応用先の拡大に向けた研究が盛んに行われている。

量子コンピュータによる機械学習は、量子計算におけるホットトピックのひとつである。材料設計においても機械学習が広く活用されつつあり、量子コンピュータとの組み合わせは興味深い研究対象のひとつである。特に、量子コンピュータによる機械学習では量子状態を入力として受け取ることができるため、量子化学計算との親和性は高いと考えられる [4, 5]。

最後に、材料の探索自体を量子コンピュータで行う、という方向性が考えられる [6]。量子コンピュータが十分進化した際にはこのようなアプローチが一般的になる可能性もあり、材料設計を大きく変える力を秘めていると言える。

参考文献

- [1] J. Preskill, *Quantum* **2** (2018) 79.
- [2] A. Peruzzo, J. McClean et al., *Nature communications* **5** (2014) 1–7.
- [3] A. Y. Kitaev, *arXiv preprint quant-ph/9511026* (1995).
- [4] H. Kawai and Y. O. Nakagawa, *Machine Learning: Science and Technology* **1** (2020) 045027.
- [5] H.-Y. Huang, M. Broughton et al., *arXiv preprint arXiv:2112.00778* (2021).
- [6] P. K. Barkoutsos, F. Gkritis et al., *Chemical Science* **12** (2021) 4345–4352.