

材料開発に向けた量子アプリケーション研究開発 ～量子化学計算と量子ダイナミクス計算～

Quantum Application Research Development for Materials Developments

-Quantum Chemistry and Quantum Dynamics Computations-

豊田中研 平井 宏俊

Toyota Central R&D Lab. Hirotoshi Hirai

E-mail: hirotoshih@mosk.tytlabs.co.jp

材料開発に向けた量子コンピュータのアプリケーション開発に取り組んでいる。本講演では、主に NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) デバイス向けのアルゴリズム (VQE、VQD、VQS など) を用いた量子化学計算による内殻励起状態・内殻イオン化エネルギー状態の計算例 (図 1)、非断熱脱励起過程シミュレーションへの適用例 (図 2)、電子-原子核系の多体波動関数の虚時間発展を用いた局所安定状態に捕われない分子構造最適化手法のコンセプト (図 3) について紹介する。また、実機計算を行う際の課題についても議論する。

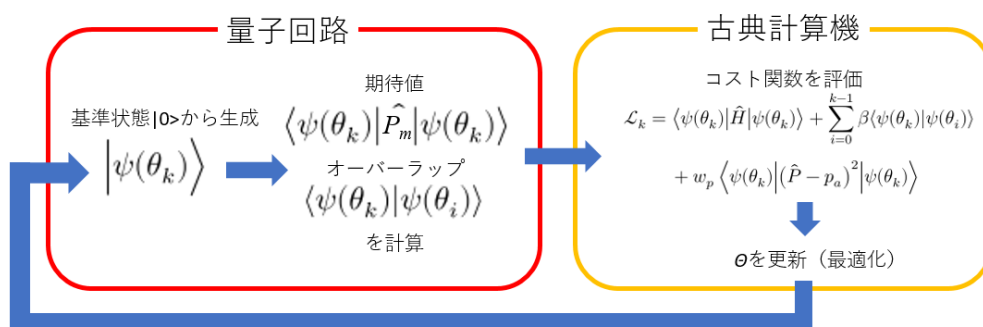


図1 VQDによる励起エネルギー計算の概要

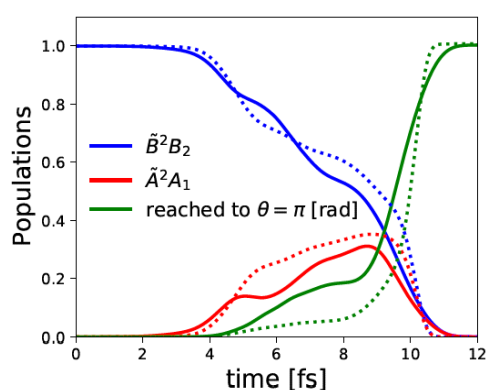


図2 水イオン分子の脱励起シミュレーション
SSVQE (実線) と CASSCF (点線) の比較

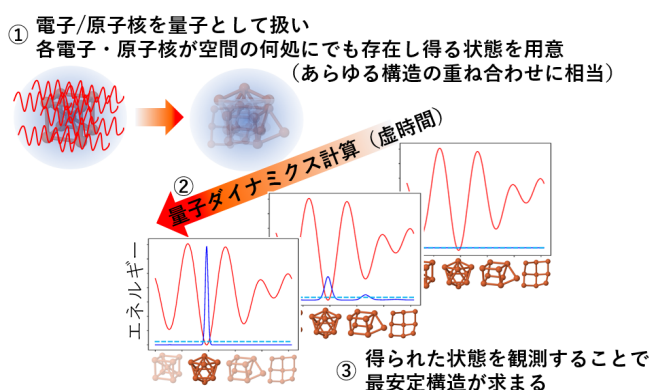


図3 量子ダイナミクスを用いた
分子構造最適化のコンセプト

[謝辞] 本講演で紹介する研究の一部は株式会社 QunaSys との共同研究にて遂行されたものです。
この場を借りて深く御礼申し上げます。