量子コンピュータによる量子化学計算：量子位相差推定アルゴリズムの開発

(阪市大院理 [1]・JST さきがけ [2]・TCG 科学技術研究教育センター/量子工学研究所 [3])
○杉﨑研司 [1,2,3]・酒井智香子 [1]・豊田和男 [1]・佐藤和信 [1]・塩見大輔 [1]・工位武治 [1]

Quantum chemical calculations on quantum computers: Development of a quantum phase difference estimation algorithm

([1]*Graduate School of Science, Osaka City University*, [2]*JST PRESTO,* [3]*Centre for Quantum Engineering, Research and Education, TCG Centres for Research and Education in Science and Technology*) ○Kenji Sugisaki,[1,2,3] Chikako Sakai,[1] Kazuo Toyota,[1] Kazunobu Sato,[1] Daisuke Shiomi,[1] and Takeji Takui[1]

The quantum phase estimation algorithm is capable of computing the full-CI energy with a polynomial cost on a quantum computer. The total energy strongly depends on the size of molecule, but the magnitude of energy difference to be discussed is not greatly dependent on the molecular size. It is very valuable if we can calculate the energy gap directly without inspecting the total energies of molecule. In this work, we developed a Bayesian phase difference estimation algorithm, which allows us to calculate the energy gap of two electronic states directly on a quantum computer.

Keywords : quantum computers, quantum chemical calculations, quantum algorithms, full configuration interaction method

量子化学計算は量子コンピュータの近い将来の計算ターゲットとして注目を集め、非常に活発に研究が行われている。量子化学計算のための量子アルゴリズムは大別すると量子位相推定(QPE)に基づく full-CI 計算法と変分量子固有ソルバー(VQE)を用いた近似波動関数計算法がある。QPE は非常に多くの量子ゲート操作を必要とするため、誤り耐性量子コンピュータ(FTQC)が実現しないと意味のある計算結果を得ることは難しいが、古典コンピュータでは分子軌道数に対して指数関数的に増加する full-CI 計算コストが QPE を用いると多項式になることが理論的に示されているため、FTQC 時代に有力な計算手段となると期待されている。

QPE による full-CI 計算では、波動関数の時間発展により生じる位相変化にエネルギー固有値の情報が含まれていることを利用し、時間発展前後の波動関数の位相差を決定することでエネルギーを求める。一方で、量子化学計算で扱う多くの問題は全エネルギーとは桁違いに小さなエネルギー差を議論する。また、全エネルギーは分子サイズに大きく依存するが、たとえば化学反応で議論されるエネルギー差の大きさは分子サイズにほぼ依存しない。これらの理由から、量子コンピュータを用いてエネルギー差を直接計算できれば非常に有用である。今回我々は、エネルギー差を求めたい 2 つの電子状態の量子重ね合わせ状態を利用することで full-CI 法でのエネルギー差を直接計算することができる量子位相差推定アルゴリズム [1)]を開発したので報告する。

1) K. Sugisaki, C. Sakai, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, Bayesian phase difference estimation: a general quantum algorithm for the direct calculation of energy gaps. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 20152–20162.

© The Chemical Society of Japan