

量子コンピュータによる量子化学計算#5 - 第2周期原子を含む系 -

Improvements of quantum chemical calculations with quantum computers

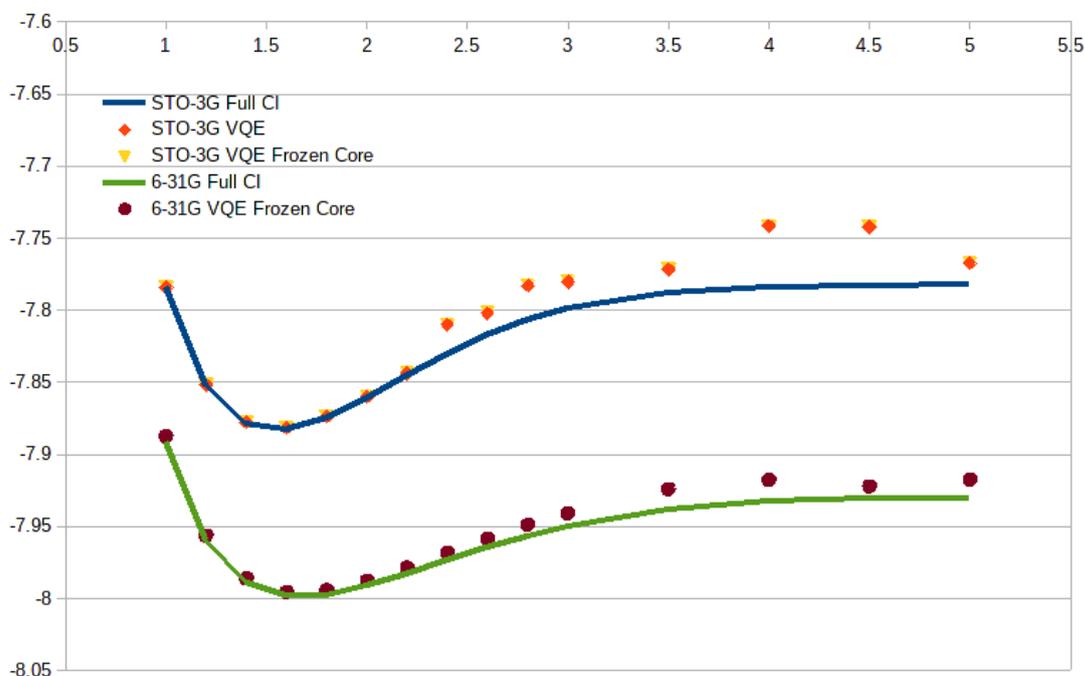
blueqat (株)¹, 立教大理², 東大生産研³, 大阪市大理⁴JST さきがけ⁵, TCG 科学技術研究教育センター/量子工学研究所⁶○加藤拓己¹, 奥脇弘次², 望月祐志^{2,3}, 杉崎研司^{4,5,6}, 湊雄一郎¹blueqat Inc.¹, Rikkyo U.², U. Tokyo³, Osaka City U.⁴, JST PRESTO⁵, CQuERE/TCG-CREST⁶°Takumi Kato¹, Koji Okuwaki², Yuji Mochizuki^{2,3}, Kenji Sugisaki^{4,5,6}, Yuichiro Minato¹

E-mail: kato@blueqat.com

【序】 総説[1-3]にあるように、ここ数年で「量子コンピュータでの量子化学計算」は実用化に向けて確実に歩を進めつつあります。こうした中、私たちは大学の授業・演習や企業の研究開発のOJTでの利用を意識したシステム開発を行ってきています。前回(20年秋期)では量子計算環境Blueqat [4]への D_{2h} 対称性の導入による H_2 分子の 6-31G**基底での計算を報告しましたが、今回は第2周期の原子を含む系で C_{2v} 対称性を使った事例をご紹介します。

【求解フロー】 基本的な流れはこれまでと同様です。与えられた分子構造に対し、PySCF [5]を使って HF 計算と分子積分の取得を行い、OpenFermion [6]によって Bravyi-Kitaev 変換してスピンのハミルトニアンを生成し、Blueqat [3]が UCCSD 波動関数でエネルギーを求めます。

【LiHの結果】 LiHの固有対称性は $C_{\infty h}$ ですが、アーベル群の C_{2v} で求解します。基底関数を 6-31G とすると占有軌道は2個、仮想軌道は9個となります。下図に基底関数を STO-3G として Li-1s を凍結しない場合とした場合、および、基底関数を 6-31G として Li-1s を凍結した場合で描いたポテンシャルエネルギー曲線を示します。極小点付近での計算時間は各々82秒、3.4秒、1531秒です。内殻の凍結を導入しない場合には計算が困難であることが分かります。計算にはクラウド計算環境である Amazon Web Services の SageMaker ml.m5.4xlarge インスタンス(Xeon Platinum 8259CL 2.50GHz 16コア、メモリ 64GB)を利用しました。当日の発表では、古くから多配置性のテスト系として取り上げられてきた Be への H_2 の挿入経路のトレース[7]もお示しする予定です。



【参考文献】 [1] Cao et al., Chem. Rev. 119 (2019) 10856. [2] McArdle et al., Rev. Mod. Phys., 92 (2020) 015003-1. [3] Bauer et al., Chem. Rev. 120 (2020) 12685. [4] (<https://github.com/Blueqat/Blueqat>). [5] (<https://sunqm.github.io/pySCF/>). [6] (<https://github.com/quantumlib/OpenFermion>). [7] Purvis et al., Intern. J. Quant. Chem. 23 (1983) 835.