

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 計算化学のフロンティアを拓く革新的複素数波動関数量子シミュレータの開発

2. 個人研究者名

水上 渉（大阪大学量子情報・量子生命研究センター 准教授）

3. 事後評価結果

本研究は量子化学計算において古典計算に対する量子優位性を得るために、古典コンピュータが不得手とする問題を選ぶことを提唱している。即ち、空間対称性、スピン対称性、実数対称性がない系を対象としたとした複素数波動関数を用いるアルゴリズム開発を目的とした。また、実用的な量子化学シミュレーションを行うためにエネルギー微分などの物性値を計算する手法の開発も行った。

本研究では 1) 電子の散逸を有限基底で記述するための開放条件として複素数ポテンシャルを導入した系、2) 周期境界条件のかかった系、3) Schrödinger方程式ではなくDirac 方程式によって相対論効果を考慮した系（スピン対称性の崩れた系）、4) 強磁場下でかつ相対論効果を考慮した系の4つについてVQE を開発・実装した。さらに、それぞれの特徴を吟味した結果、Dirac 方程式によって相対論効果を考慮した系が量子コンピュータの優位性を実証するうえで最も有望であると結論した。定量的な考察を行うために誤り耐性量子コンピュータを仮定した位相推定アルゴリズムに必要な計算リソースを見積もった。その結果、Dirac方程式を解く問題ではより小さな系で量子と古典の逆転が起きることが明らかになった。一方、計算の実行時間の観点からするとDirac方程式の問題は特に有利にならないことも示された。このことから量子コンピュータに有利な系は「量子状態が複雑」かつ「ハミルトニアンが単純」な場合であるという洞察を得ている。これを発展させて、物性物理の問題の方が量子化学よりも早く量子優位性が示されることが明らかになった。これはさきがけ領域研究者との共同研究の成果であるが、本研究者の洞察が一つの駆動力となったことが想像される。以上の結果は今後の量子コンピュータ応用の指針を与えるものとして重要な結果である。本研究によって量子化学の問題に対する方法論開発や量子コンピュータの化学応用についての課題が明確化されたといえる。

また、実用的な量子化学シミュレーションに向けた物性値計算手法については、軌道最適化VQE法を開発して微分の計算を効率化した。これによって多原子分子の構造最適化を実現した。さらに、微分法の拡張により励起状態を扱うことができるようになり、光化学反応や2階微分が必要な分極率の計算に適用された。これは量子化学計算における有用なツールとなるものと思われる。

量子コンピュータならではの化学応用について常に意識し、検討結果に応じて計画を柔軟に修正していったことも評価したい。研究費執行については、必要な計算化学ソフトウェアの購入と専用の計算機に有効に使われた。また、実機を使用する予算を確保することで量子コンピュータの実機ノイズの影響やノイズ耐性に関する研究も実施した。また、最終年度には2名の補助者を雇用し研究のサポートを得ている。

当初より対象系としてきたウラン二量体の計算と解析は未達成となっている。今後アルゴリズムの開発を続けることでこのような難しい系について量子コンピュータが貢献できることを示していただきたい。一方、解析的微分法の開発と実装により量子コンピュータを用いた化学シミュレーションを可能にしたことは評価できる。実際、これに関連した3件の論文はTop10%に入っている。QunaSys 社が開発しているクラウドサービスQamuy に固体系の計算や解析微分の機能は実装されており、今後化学系の企業を中心に活用が進むことが期待できる。

なお、本研究者は研究期間中に大阪大学量子情報・量子生命研究センター准教授に昇任している。