



大阪科学・大学記者クラブ 御中  
(同時資料提供先：科学記者会)

2020年9月17日  
大阪市立大学

## 量子コンピュータを用いた量子化学計算の新手法

# 「スピン汚染」を効率的に取り除く 新規量子アルゴリズムの開発に成功！

<本研究のポイント>

- ◇ 量子コンピュータを用いると、原子・分子のエネルギーを精密に求める量子化学計算が超高速に実行できる。
- ◇ 分子は「スピン状態」が異なると反応性なども異なるので、正しい「スピン状態」について量子化学計算をしなければ化学的に意味のある議論ができない。
- ◇ 量子コンピュータを用いた量子化学計算で、「スピン状態」がずれた（「スピン汚染」）ときに、「スピン汚染」を効率的に取り除くことができる新規手法の開発に成功。

<概要>

大阪市立大学大学院理学研究科の杉崎 研司（すぎさき けんじ）特任講師、佐藤 和信（さとう かずのぶ）教授、工位 武治（たくい たけじ）名誉教授らの研究チームは、量子コンピュータを用いて分子の量子化学計算を行ったときに、望んでいるスピン量子数を持つ波動関数を正しく得るための新規手法として、「スピン汚染」(望んでいないスピン量子数を持つ波動関数成分)を効率的に取り除くことができる新規量子アルゴリズムを発表しました。これにより、精密さが求められる実際の化学研究に量子コンピュータを役立てるために乗り越えなければならない課題の1つが解決されました。

本研究成果は、国際学術誌 Physical Chemistry Chemical Physics（オープンアクセス）に、Communication として9月17日18時（日本時間）に Online 掲載されました。

<掲載誌情報>

雑誌名：Physical Chemistry Chemical Physics

論文名：A probabilistic spin annihilation method for quantum chemical calculations on quantum computers

著者：Kenji Sugisaki, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Takeji Takui

掲載 URL: <http://dx.doi.org/10.1039/d0cp03745a>

<研究背景>

近年、スーパーコンピュータを含めた従来のコンピュータ（古典コンピュータという）を凌駕する性能を持つ量子コンピュータの研究が国内外で盛んに行われています。特に、原子や分子の微視的性質を支配する Schrödinger 方程式<sup>\*1</sup>を正確に解き、エネルギーを正確に求める問題（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ています。原子・分子のエネルギーの超精密計算は、古典コンピュータ上で実行すると計算時間が分子サイズに対して指数関数的に増大する（指数爆発と呼ばれる）のに対し、量子コンピュータを用いると「計算時間の指数爆発」を抑えることができ、現実時間内に精密計算が実行可能であることが理論的

に示されています。現在、量子コンピュータを用いて原子・分子のエネルギーをより高速に求めるための手法や分子の安定構造を探索する手法、分子の吸光・発光波長を計算する手法など、様々な理論手法の開発研究が世界各地で活発に行われています。

分子は「スピン量子数<sup>\*2</sup>  $S$ 」と呼ばれる内部自由度が異なるだけで、化学反応性や分子物性が大きく変化します。例えば酸素分子は最も安定な状態ではスピン量子数  $S=1$  を持ち（スピン三重項状態という）、生命活動に欠かせない役割を担います。しかし、準安定状態であるスピン量子数  $S=0$  の状態（スピン一重項状態という）にある酸素分子は活性酸素として老化や様々な疾病の原因となることがあります。量子化学計算によって化学現象を正しく理解するには、分子について正しいスピン量子数  $S$  を持つ電子状態（スピン状態）について精密に計算できることが非常に大切です。同研究グループは昨年、量子コンピュータを用いた量子化学計算で、どのスピン状態が求まったかを決定できる量子アルゴリズムを報告しています(K. Sugisaki et al, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, *21*, 15356–15361.)。しかし、量子コンピュータ上で、任意の波動関数について、「スピン汚染」（望んでいないスピン状態成分）を効率的に取り除き、正しいスピン状態の波動関数を得る手法はこれまで報告されていませんでした。

### <研究内容>

「スピン汚染」では一般に、求めたい電子状態のスピン量子数を  $s$  とすると、スピン量子数が 1 だけ大きい、スピン量子数  $S=s+1$  の波動関数成分が主なスピン汚染源となります。そのため、スピン量子数  $S=s+1$  成分を除去することが重要です。

本研究では、以前に同研究グループが開発したスピン状態を決定する量子アルゴリズムを一部修正することによって、スピン汚染成分を効率的に取り除くことができることを明らかにしました。以前に開発した、スピン状態を決定するための量子論理回路（量子サーキット）を図 1(a)に、本研究で用いた量子論理回路を図 1(b)に示します。図 1(a)の量子論理回路では、スピン二乗演算子  $S^2$  のもとでの波動関数 $|\Psi\rangle$ の時間発展量子シミュレーションを実行して、量子位相推定<sup>\*3</sup> と呼ばれるテクニックを用いることによって、スピン量子数  $S$  を決定しています。図 1(b)の量子論理回路では、波動関数 $|\Psi\rangle$ の時間発展の長さ  $t$  と一番上の量子ビットに作用する一量子ビット回転ゲート  $Z^\eta$  の回転角  $\eta$  を調節することで、スピン量子数  $S=s$  である波動関数が量子論理回路の入力として用いられたときには量子ビットの測定で必ず $|0\rangle$ 状態が、一方スピン量子数  $S=s+1$  である波動関数が量子論理回路の入力として用いられたときには量子ビットの測定で必ず $|1\rangle$ 状態が得られるように考案されています。スピン汚染された波動関数を量子論理回路の入力として用いたときには、量子ビットの測定で $|0\rangle$ 状態が得られれば演算は成功し、スピン汚染成分を除去することができます。

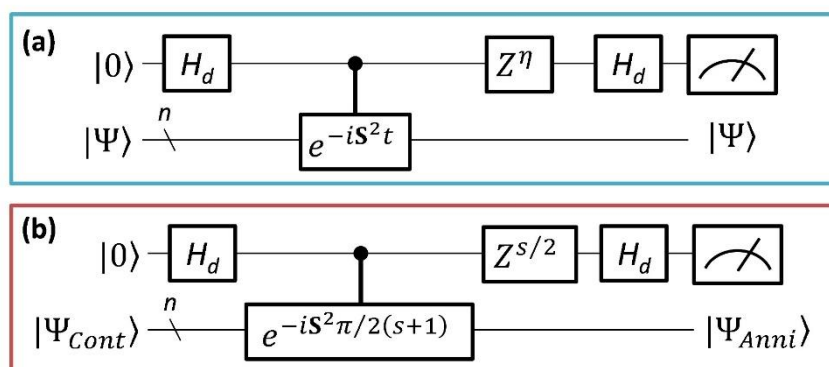


図 1. (a) 同研究グループが以前に開発した、量子コンピュータ上で任意の波動関数のスピン量子数を決定するための量子論理回路。

- (b) 本研究で提案した、スピン汚染された波動関数から不要なスピン状態の波動関数成分を除去するための量子論理回路。

量子コンピュータによる量子化学計算では、複雑な量子状態変換を基本的な量子ゲートの組で実現するために Trotter 分解<sup>\*4</sup> と呼ばれる手法がしばしば用いられます。分子サイズが大きくなると量子ゲート数が増え、演算時間が長くなるだけでなく、Trotter 分解によるエラーが増加してしまいます。Trotter 分解によるエラーは「スピン汚染」を引き起こすため、大きな分子の量子化学計算を実行するにはスピン汚染成分の除去は必要不可欠です。本手法は「スピン汚染」を取り除いた波動関数を得ることを可能にするので、長い量子演算の途中で定期的に本手法を適用し、「スピン汚染」を適宜取り除くことにより、最終的に量子コンピュータ上で量子化学計算を実行した時に正しいスピン状態が得られる確率を高めることができます。

古典コンピュータ上の量子化学計算では、スピン汚染を取り除く方法として、スピン消滅演算子  $\mathbf{A}_{s+1}$  がしばしば用いられます。スピン消滅演算子  $\mathbf{A}_{s+1}$  はスピン量子数  $S = s + 1$  を持つ波動関数を選択的に除去することができますが、スピン量子数がより大きな波動関数成分 ( $S = s + 2$  など) の相対的な重みが増えてしまうという欠点があることが知られています。これに対し、本研究で提案した量子アルゴリズムは、 $S = s + 1$  の波動関数成分だけでなく、スピン量子数がより大きな波動関数成分も部分的に取り除くことができ、スピン消滅演算子  $\mathbf{A}_{s+1}$  よりも「スピン汚染」除去能力に優れていることが明らかになりました。

#### <今後の展開と応用について>

量子化学計算で化学現象を正しく理解するには、スピン状態を正しく求めることが必要不可欠です。本研究で得られた成果は、量子コンピュータを用いた精密な量子化学計算において、望んでいるスピン状態の波動関数を得るための鍵となる手法であり、量子コンピュータを実際の化学研究に役立てるために乗り越えなければならない課題の1つが解決されました。

#### <用語>

\*1 Schrödinger (シュレーディンガー) 方程式: 量子力学的な状態を表す波動関数の時間的変化を規定する偏微分方程式で、非相対論的な量子力学の基礎となるもの。

\*2 スピン量子数: 電子のスピン角運動量の大きさを特徴づける量子数であり、1つの電子はスピン量子数  $S = 1/2$  を持つ。一般に分子は複数の電子をもつので、分子のスピン量子数は正の整数または半整数 ( $S = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ ) となる。分子内では一般に2つの電子はペア (電子対) を作って安定化し、基底状態のスピン量子数は  $S = 0$  (スピン一重項状態と呼ぶ) となることが多いが、分子内に「不対電子」と呼ばれる電子対を作っていない電子を持つ分子 (開殻分子という) ではスピン量子数  $S$  が 0 ではない電子状態が基底状態となる、あるいは基底状態のエネルギー的近傍に現れる。

\*3 量子位相推定: 量子コンピュータを用いて、波動関数の時間発展演算子などのユニタリー演算子の固有値を、古典コンピュータよりも指数関数的に速く計算することができる量子アルゴリズム。量子化学計算だけでなく、線形方程式を解く量子アルゴリズムなど、様々な問題に応用されている。

\*4 Trotter 分解: ハミルトニアンのもとでの時間発展演算子  $\exp(-iHt)$  を基本的な量子ゲートを組み合わせて量子コンピュータに実装するために用いられる。ハミルトニアン  $H = \sum_m h_m$  は多数

の項から成り立っており、項を作用させる順番を入れ替えると異なる結果を与えるような項の組がたくさん存在するため、以下に示すように時間発展演算子  $\exp(-iHt)$  を式(1)右辺のように項を分解すると、項を作用させる順番を指定したことによるエラーが生じる。そこで、式(2)のように時間  $t$  を短く区切って時間発展演算子を実装することでエラーを減らす手法をトロッター分解と呼ぶ。なお、式(2)に示したものは一次のトロッター分解である。

$$\exp(-iHt) = \exp(-i \sum_m h_m t) \approx \prod_m \exp(-ih_m t) \quad (1)$$

$$\exp(-i \sum_m h_m t) \approx [\prod_m \exp(-ih_m t/N)]^N \quad (2)$$

#### <資金・共同研究者・特許等について>

本研究は、AOARD Scientific Project on “Molecular Spins for Quantum Technologies” (Award No. FA2386-17-1-4040, 4041), JSPS KAKENHI (Grant No. 17H03012, 18K03465)、JST さきがけ「革新的な量子情報処理技術基盤の創出」(Grant No. JPMJPR1914)の対象研究です。

#### 【本件に関するお問合せ先】

大阪市立大学 広報課 担当：西前

TEL：06-6605-3411 E-mail：t-koho@ado.osaka-cu.ac.jp

#### 【研究内容に関するお問い合わせ】

大阪市立大学 大学院理学研究科 物質分子系専攻 杉崎 研司 (すぎさき けんじ)

TEL：06-6605-2555 E-mail：sugisaki@sci.osaka-cu.ac.jp

または、工位 武治 (たくい たけじ)

TEL：06-6605-2605 E-mail: takui@sci.osaka-cu.ac.jp