

量子多体系の実時間発展シミュレーションプログラムの開発
ー量子位相推定による量子化学計算のエッセンスを気軽に体験するー

松澤 優太

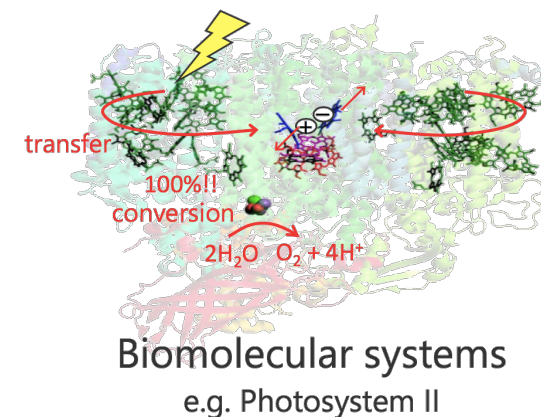
▶背景

量子化学とは…

電子状態についてのシュレディンガー方程式を計算機を使って解くことで
さまざまな分子の構造・物性・反応を理解・予測・制御することを目指す分野

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$$

現在、古典コンピュータ上で多電子波動関数を取り扱うことによる
系のサイズや計算精度上の制約があり、
量子コンピュータの活用によりこれらの課題が解決されることが期待されている



量子コンピュータを量子化学計算に活用する方法として、現在までに
量子変分アルゴリズムや量子位相推定にもとづく様々な手法が研究・開発されてきている
しかし、未だに多くの量子化学ユーザーにとって、これらのアルゴリズムは馴染みが薄い
今後の実用的なアルゴリズムの開発のために、量子化学ユーザーに広くこれらの知識が普及することは有益である



▶本プロジェクトの開発目標

量子位相推定アルゴリズムにより分子の固有エネルギーの推定を行うプログラムの制作

- ポピュラーな量子化学計算プログラムであるPySCFへの接続と可視化機能の充実により、
量子コンピュータになじみのないユーザーが気軽に
量子位相推定による量子化学計算（固有エネルギー推定）に触れることができるソフトウェアを開発する

▶ 入力



通常のPySCFの入力ファイル
(原子核の配置・電子数・空間対称性等を記述) に
2行加えるだけの**ごくシンプル**な入力ファイル

実行も**コマンド1行**で可能
(Pythonインタプリタに入力ファイルを渡すだけ)

```
from pyscf import gto
mol = gto.Mole()
mol.basis = "sto-6g"
mol.verbose = 0
mol.spin = 0
mol.atom = [["Li", (0.0, 0.0, 0.0)], ["H", (0.0, 0.0, 1.5)]]
mol.symmetry = True
mol.build()
```

```
import freqerica
freqeica.kernel(mol, norb=5, nelec=2)
```

```
$ python LiH.py
```

▶ 処理 (量子コンピュータを使って固有エネルギーを推定する: 位相推定)

時刻 t における電子波動関数 $|\Psi(t)\rangle$ を量子回路によりシミュレート

波動関数の自己相関関数を計算

フーリエ変換/Prony-like法により固有エネルギーを推定

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle = \sum_k c_k e^{-iE_k t} |\Psi(0)\rangle$$

$$c(t) = \langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle = \sum_k c_k e^{-iE_k t}$$

$$\mathcal{F}[c(t)] = c(E)$$

▶ 出力



- ◆ 分子の固有エネルギーの値 $\{E_k\}$ の推定結果
 - ◆ 量子回路のシミュレーションの詳細 etc.
- が**可視化されたHTML文書**を出力する

