

# 量子コンピュータを用いた化学シミュレーション

## 量子化学に向けた量子古典混合アルゴリズムの開発

水上 渉

MIZUKAMI Wataru

大阪大学先導的学際研究機構 特任准教授

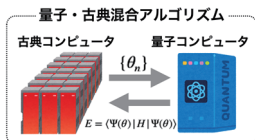


図1 量子・古典混合アルゴリズムは古典コンピュータと量子コンピュータがそれぞれの得意な部分を担うアプローチ

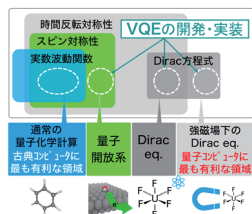


図2 量子コンピュータが得意な複素数波動関数が現れる領域をターゲットとするVQEを開発・実装し、量子加速を目指す

量子コンピュータはまもなくNISQマシン（数十から数百程度の量子ビット（qubit）からなるエラー訂正機能のないタイプ）として実用化が始まると言われています。

我々は、量子化学の分野において、1) 物性値算出や分子構造最適化に不可欠な解析的エネルギー微分を行う方法、2) 限られたqubit数を効率的に用いる方法を開発し、実用的量子化学計算を量子・古典ハイブリッドアルゴリズム（VQE、図1）で行える前段階にまで発展させてきました。現在、量子コンピュータの強みを圧倒的に生かすため、Dirac方程式（特殊相対論を考慮した波動方程式）と量子開放系を高効率に解くVQEの開発を進めています。古典の置き換えではなく古典が避けてきた領域への挑戦で、「複素数波動関数が生じる量子化学問題に対する量子加速」という新しい可能性の実現が期待されます（図2）。



**キーワード**

NISQ : Noisy Intermediate Scale Quantum Computing  
VQE : Variational Quantum Eigensolver

**応用分野**

金属触媒の反応過程（窒素固定・二次電池・メタン活性化）、光機能材料（太陽電池・有機EL・光合成）

### [研究の先に見据えるビジョン]

自然界の窒素固定や光合成の人工的な模倣は、量子コンピュータが必要と考えられています。エネルギー消費を飛躍的に抑え地球温暖化問題を解決するとともに、新たな産業の基盤を実現します。

### NISQマシンから始まる量子コンピュータの社会実装

