

**補助ビットを一つ追加することによる虚時間発展：
量子化学計算のための第一量子化固有計算機、First-quantized
eigensolver**

与えられたハミルトニアン基底状態を得るための量子計算アルゴリズムは、例えば量子化学計算や最適化の観点などから、強く求められている。本研究において我々は、誤り耐性のある量子ゲート型コンピューターのための、虚時間発展法に基づく新しい基底状態計算フレームワークを提案した。

虚時間発展法はその非ユニタリ性のため、量子回路上での実装は単純ではない。しかし、補助ビットを一つ追加することによる空間の拡張と、補助ビットの観測を利用することによってこれを可能とする手法を提案し、確率的虚時間発展法 (PITE) と名づけた。具体的には補助ビットを観測して、ある確率で 0 状態が得られた場合に、虚時間発展した量子レジスター状態が得られるように回路が構成されている。これは、非変分的であるという点で既存の手法とは大きく異なる。また、与えられたハミルトニアンによる実時間発展が実装できれば PITE 回路を構成できるという特徴があり、多くの実時間発展に関する既存技術をそのまま応用可能である。

さらに、PITE の量子化学計算への適用例として、第一量子化に基づくスキームを提案し、その名を First-quantized eigensolver (FQE) とした。演算数の観点から、第二量子化と比べて第一量子化の方が、システムサイズに対して良いスケーリングを示す。

PITE 法に基づいて、分子系の構造最適化、磁場下の系の計算への応用、量子振幅増幅との組み合わせなどがすでに我々のグループから報告されており、PITE 法の幅広い応用可能性を示している。