

量子計算機上の虚時間発展による 第一量子化ハミルトニアンに基づく構造最適化

量子コンピュータは、波動関数の空間的なエンコーディングにおける表現力が高いため、古典的なコンピュータに対する有望な代替手段と考えられている。我々のグループでは多体問題における基底状態の計算に関して、非変分的なアプローチとして虚時間発展法を提案している。本研究では、第一量子化ハミルトニアンに基づく分子の構造最適化のための量子アルゴリズムを虚時間発展法に基づいて構築した。提案された枠組みでは、原子核は古典的な点電荷として扱い、電子は量子力学的な粒子として扱う。これは、無数の幾何学的候補構造からの全探索を行うことに対応する。また、原子核を古典的にエンコードすることで、フェムトメートルスケールの波動関数を表現する必要がなくなるために必要な量子ビットの数を削減できる。虚時間発展法によって生成された出力状態の繰り返し測定から、エネルギー一面の大域的最小値を与えるヒストグラムを得る。本研究で提案された方法が、量子化学における実用的な量子コンピュータの実現に寄与することを期待する。