

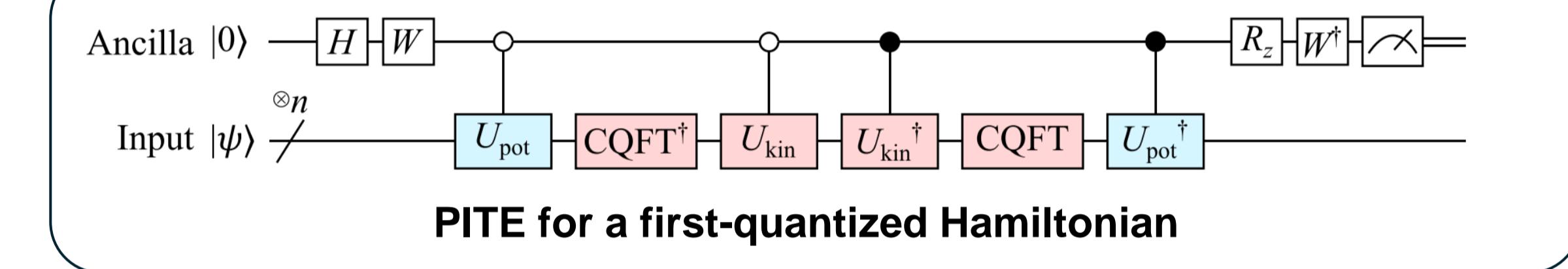
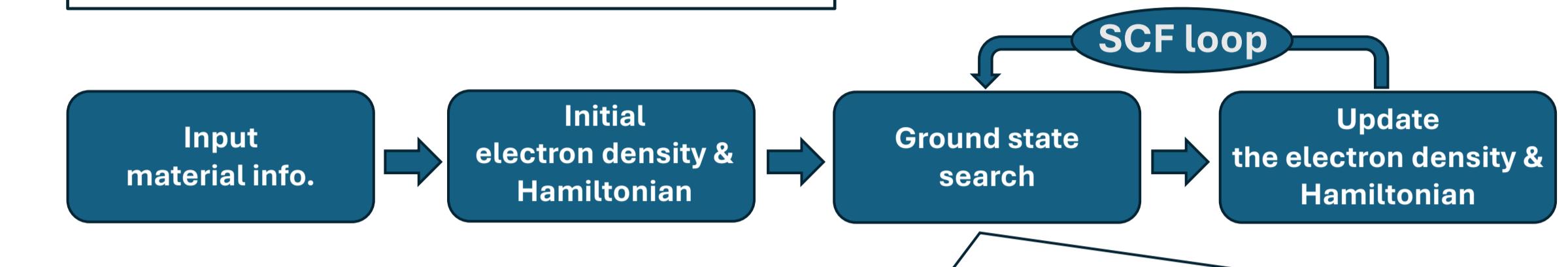
量子コンピュータを利用したOrbital-free DFT計算

Orbital-free DFT with quantum computation

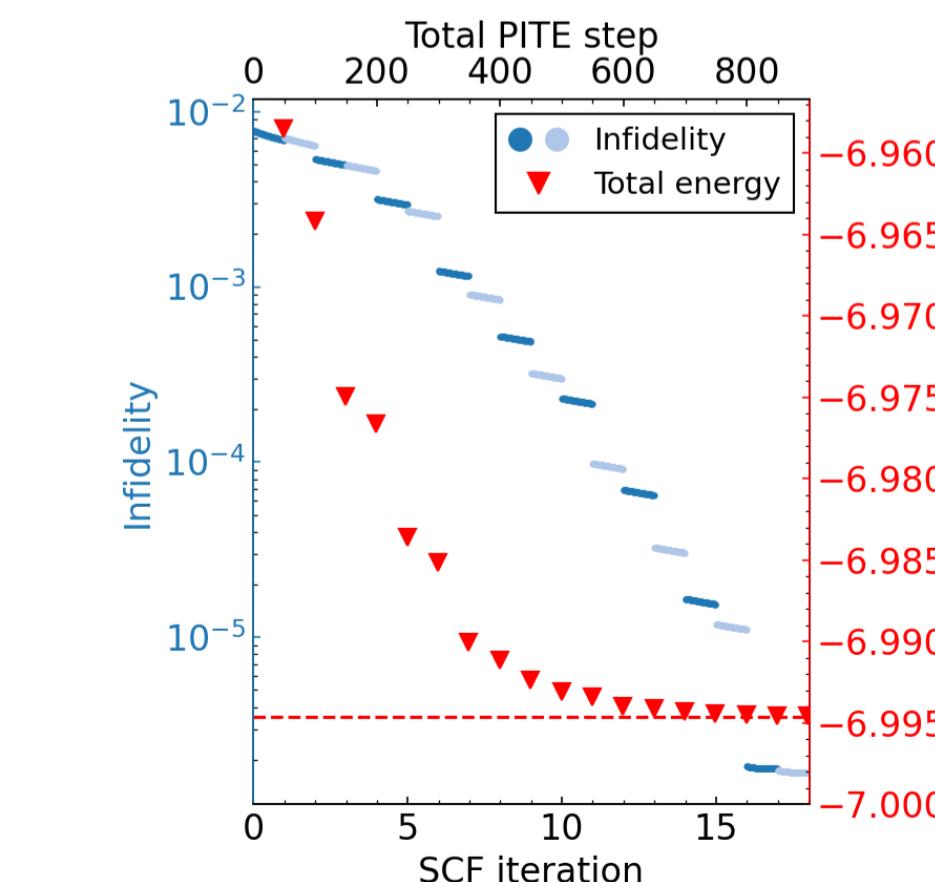
量子コンピュータを利用した無軌道密度汎関数理論(Orbital-free DFT)に基づく材料計算手法を提案しました。無軌道密度汎関数理論において、運動エネルギー汎関数が電子密度の汎関数として解析的な表式が直接与えられた場合、与えられた一電子ハミルトニアンの最低固有状態のみを、電子密度を更新しながら繰り返し解くことで、最終的に解である電子密度と全エネルギーを取得することが可能になります。本手法では、このハミルトニアンの最低固有状態を求める部分に、耐障害量子計算機のためのおアルゴリズムである、第一量子化形式における確率的虚時間発展法(PITE)を適用しました。量子位相推定(QPE)などと組み合わせることにより、高速な最低エネルギー固有値の取得と自己無撞着場(SCF)計算の部分的な加速が期待できます。

We proposed a materials calculation method based on orbital-free density functional theory (OFDFT) using quantum computers. In OFDFT, when the analytical form of the kinetic energy functional is directly given as a functional of the electron density, it is possible to obtain the final solution, the electron density and total energy of the ground state, by iteratively solving only the lowest eigenstate of a given one-electron Hamiltonian while updating the electron density. A quantum algorithm for fault-tolerant quantum computers (FTQC), probabilistic imaginary time evolution (PITE), in the first quantization is applied to the part of this method that finds the lowest eigenstate of the Hamiltonian. Combined with quantum phase estimation (QPE), it is expected to obtain the lowest energy eigenvalues at high speed and partially accelerate self-consistent field (SCF) calculations.

Flowchart of orbital-free DFT with PITE



Infidelity and total energy at each SCF step for Si crystal



Convergence of the electron density

