

量子コンピューターによる固体の表面反応に関する 量子化学計算アルゴリズムの開発

Developing Quantum Chemical Calculation Algorithms
for Surface Reactions on Solids Using Quantum Computers

M20海自19

派遣先 トロント大学(カナダ・トロント)

期 間 2020年8月16日～2021年8月15日(365日間)

申請者 東京工業大学 博士後期課程3年 菅 野 志 優

海外における研究活動状況

研究目的

本研究は量子コンピューターを用いた固体表面の高速な反応計算アルゴリズム開発に向けた研究活動を行った。

海外における研究活動報告

固体表面反応計算の高精度化はシミュレーションによる高速な新規不均一触媒開発に不可欠である。化学反応のシミュレーションは、物質が反応中にとりうる複数の構造のエネルギーを計算することで実行できる。しかし、不均一触媒の多くは遷移金属化合物であり、遷移金属化合物はクーロン相互作用の影響が大きいために、従来のコンピューターによるシミュレーションでは必要なエネルギー計算精度が得られないことがある。そこで近年、遷移金属化合物の化学反応シミュレーションを量子コンピューターで行う研究が盛んに行われている。

留学を予定していたカナダ・トロント大学の Alan Aspuru-Guzik 研究室は化学計算向け量子コンピューターアルゴリズム(量子アルゴリズム)の分野を開拓した実績を持つ。申請者はこれまで固体のエネルギー計算に関する量子アル

ゴリズムを研究しており、これを固体表面系へと拡張する研究を本格化させるため留学を志望した。2020年初め頃に Aspuru-Guzik 教授へ直接コンタクトし、同年8月からの留学の承諾を得た。しかしパンデミックにより留学は保留となり、結局留学終了予定期間である2021年8月までに留学はできなかった。ただ留学予定期間中に、同研究室の Zoom オンラインミーティングへの参加や Slack による交流ができた。

オンラインミーティングでは研究室内外の量子コンピューターに関する研究や同研究室の人工知能サブグループのトークを聞くことができ、幅広い領域の研究について知ることができた。また、交流の一環で申請者は化学反応計算に必要な幾つかの量子アルゴリズム実装に携わったが、今回はそのうち二つを紹介する。一つ目は反応計算のサブルーチンである“物質の原子位置に対するエネルギー勾配計算”の量子アルゴリズム実装である。実装には同研究室で開発されている化学計算向け量子アルゴリズム群実行ライブラリ *tequila* を使用した。具体的には、差分法による以下の2種類の勾配計算手法を実装し比較した：①微小変位させた複数の原子配置で(量子アルゴリズムによる)エネルギー最適化を実行する方法、②一つの原

子配置のみで(量子アルゴリズムによる)エネルギー最適化した結果を用いて勾配を取得する方法。その結果、①の手法では各最適化計算で得られるエネルギーがばらつき勾配の精度が悪いのに対し、②の手法では一度の最適化計算で勾配が取得できるため、①の手法より最大で2桁高精度な結果が得られた。二つ目は化学反応計算用の量子アルゴリズムへのtequila組み込みの実装である。申請者は留学以前に、量子回路を用いた化学反応計算アルゴリズムの提案及び実装を行っていた。今回このアルゴリズムにおけるエネルギー計算のサブルーチンを自作ものからtequilaに差し替えた。水素チェーンに関するテスト計算では、初期パスからの活性化エネルギーの低下を確認できた。他のサブルーチンの差し替えや、得られる活性化エネルギーの妥当性検証は今後の研究課題

である。これら二つの実装例の他に、エネルギー勾配計算を用いた物質の構造最適化アルゴリズムなども実装した。

今回留学による固体表面反応の量子アルゴリズム開発は叶わなかったものの、海外でのミーティングや他の研究者との議論など、研究だけではなく語学に関する経験も得られた。今後は化学反応向け量子アルゴリズムの研究を続けていくとともに、パンデミック収束後の研究室への渡航も検討している。

Alan Aspuru Guzik教授および研究室メンバーには、オンラインでの研究経験をさせていただいたことに大変感謝申し上げます。また、オンラインミーティングに関する費用を援助くださった公益財団法人村田学術振興財団に厚く御礼申し上げます。