	領域代表者	埼玉大学・理工学研究科・助教 品岡 寛 (しなおか ひろし)	研究者番号:40773023
	研究領域情報	領域番号: 23B205 キーワード: 第一原理計算、量子埋め込み理論、波動関数理論、量子回路	研究期間: 2023年度~2025年度

なぜこの研究を行おうと思ったのか (研究の背景・目的)

● 研究の全体像

近年、量子力学的重ね合わせを利用することで指数的な加速が可能な量子コンピュータが急速に発展し、量子多体計算への応用が期待されている。もし、多数の電子が量子力学的に強くもつれ合うことで創発する物性を定量的に予測可能になれば、物性物理、化学に渡る基礎学理上の未解決問題や、人類が直面するエネルギー・環境問題の解決へのキーになり得る。しかし、近未来に実現される量子コンピュータには強いリソース制限があり、既存の量子アルゴリズムだけでは定量的物性予測は実現し得ない。本研究領域では、量子・古典コンピュータ双方の能力を最大限引き出すように、物性物理・化学・量子情報における情報圧縮法を融合した新しい第一原理計算学理の構築と、その核となる融合コミュニティ形成を行う。

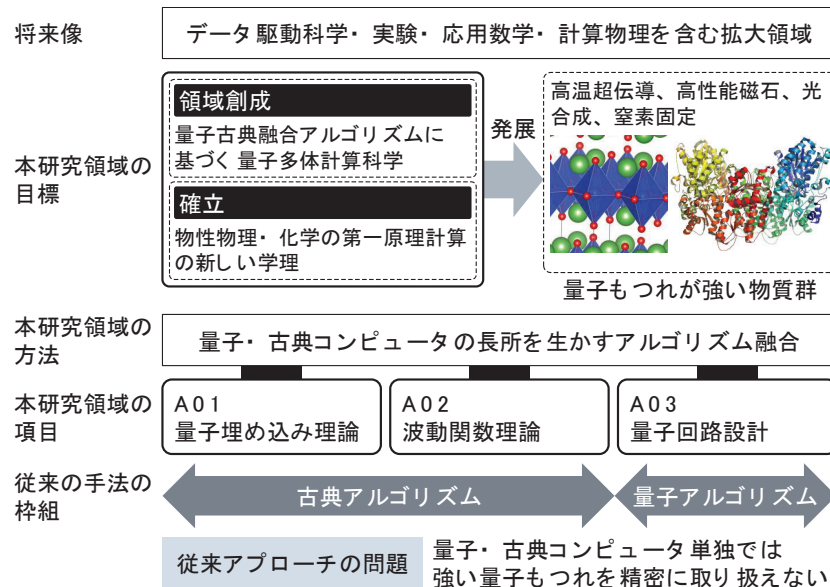
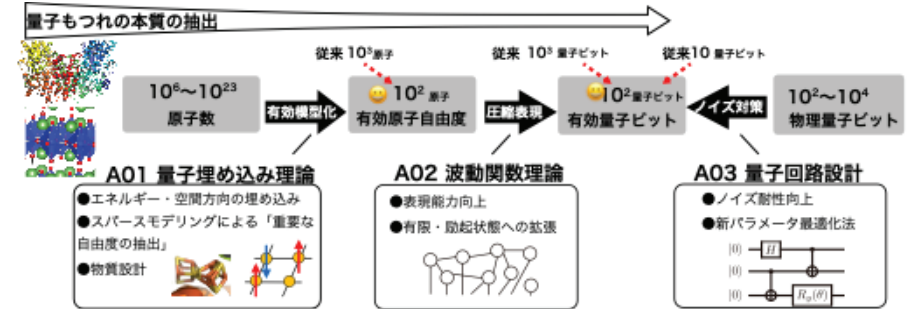


図1 本領域の全体像

● 本領域の目的とアプローチ

本研究領域は、従来の量子・古典アルゴリズム単独では達成が困難な、強い量子もつれを持つ物質の物性予測に向け、自由度(情報)を圧縮する多段スキームに基づく「新しい第一原理計算学理」の構築を目指す。その新しい学理に基づき、量子回路への最適な実装技術を開発し、プロトタイプ計算によりその学理を実証することで、新規研究領域「量子古典融合アルゴリズムが拓く計算物質科学」と「次世代の融合コミュニティ」を創生する。



量子もつれの強い物質群の定量的物性予測

図2 本領域で構築する第一原理計算の新しい学理

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

● 達成目標

図2に示すように、量子もつれの本質を抽出し、自由度(情報)を圧縮する多段スキームを構築することで、NISQの想定性能(10,000量子ビット)で、強い量子もつれを持つ物質群を解ける第一原理計算手法を確立する。そのために、物質から重要な自由度を抽出する量子埋め込み理論(A01)、量子もつれの圧縮表現(A02)、量子回路への実装法(A03)を探索する。

量子コンピュータのエミュレータ&実機を用いて、検証系として、単体遷移金属の強磁性転移温度予測、強相関電子系の基本的な模型(ハバード模型)における超伝導転移温度予測、鉄硫黄クラスターを持つ酵素“フェルレキシニヒドロゲナーゼ”の化学反応プロファイルの計算を実現する。

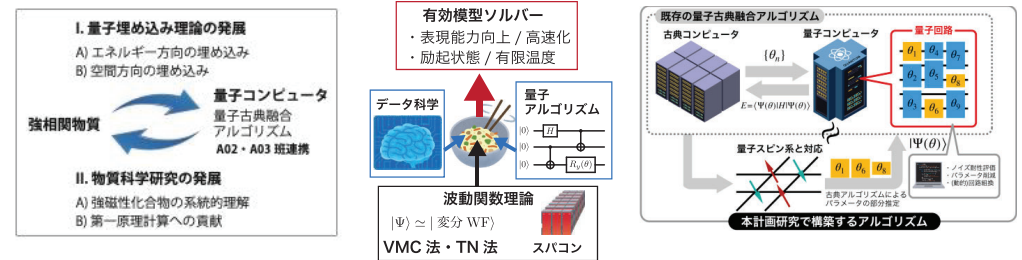


図3 各計画班の研究概要と目標

● アウトリーチ

本領域では、以下のような双方向な情報発信の他、計算物理春の学校(2023年度に第2回開催予定)への協賛を通じた若手人材育成にも取り組みます。

- オープンソースソフトウェア開発・普及
 - 仮想環境
 - MateriAppsLIVE! へ収録
 - 講習会の開催
- オンライン双方向情報発信
 - Twitterによる成果、会議、講習会情報発信
 - オンライン座談会の開催
- 企業連携
 - スタートアップ企業、化学メーカーなどの情報交換・協力

+ 計算物理春の学校

図4 本領域のアウトリーチの概要