

令和 3 年 5 月 26 日現在

機関番号：24402

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K03465

研究課題名(和文) 開殻分子系量子化学計算のための量子アルゴリズムの開発

研究課題名(英文) Development of quantum algorithms for quantum chemical calculations of open shell molecules

研究代表者

杉崎 研司 (Sugisaki, Kenji)

大阪市立大学・大学院理学研究科・特任講師

研究者番号：70514529

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：量子コンピュータを用いた開殻分子の量子化学計算の新規手法として、任意の波動関数のスピン量子数を決定することができる新規量子アルゴリズム、任意の波動関数から望んでいないスピン状態成分を除去することができる確率的スピン汚染除去量子アルゴリズム、スピン状態が異なる電子状態間のエネルギー差を特徴付けるパラメータである交換相互作用パラメータ J を、個々のスピン状態の全エネルギーを求めることなく直接計算できる新規量子アルゴリズムを開発した。これら開発した手法により、一般的な開殻一重項分子よりも複雑な電子構造を持つ開殻分子の量子化学計算も量子コンピュータ上で効率的に実行できることが理論的に示された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、一般的な分子よりも複雑な電子構造を持ち、その電子状態の解明に高精度量子化学計算が重要な役割を果たす開殻分子について、量子コンピュータを用いて量子化学計算を効率的に実行するための新規量子アルゴリズム開発を行った。開殻分子は生体内の酵素活性中心や化学反応中間体などに現れる重要な化学種であり、その電子構造解明は非常に重要な課題である。本研究を通して開発した量子アルゴリズムは、開殻分子の電子構造を特徴付ける量子数であるスピン量子数や交換相互作用パラメータを効率的に決定することを可能にし、開殻分子の高精度量子化学計算を量子コンピュータ上で効率的に実行するための道筋を示すものであるといえる。

研究成果の概要(英文)：We have developed several new quantum algorithms for the accurate quantum chemical calculations of open shell molecules on quantum computers: A quantum algorithm to determine spin quantum number of arbitrary wave functions on quantum computers, a quantum algorithm to eliminate unwanted spin components from the spin contaminated wave functions, and a quantum algorithm to directly calculate the spin state energy gaps without inspecting total energies of individual electronic states. These results open a door to applications of quantum computers to real problems in electron spin science and open shell chemistry.

研究分野：理論化学

キーワード：量子コンピュータ 量子アルゴリズム 量子化学計算 開殻分子 電子状態 機械学習

1. 研究開始当初の背景

量子化学計算は量子コンピュータの近い将来の計算ターゲットとして非常に注目を集めている。計算に用いた基底関数が張る空間のなかで変分的最適解を与える full-CI 計算はスパコンやワークステーションのような従来のコンピュータ(以下、古典コンピュータと記載する)では分子サイズに対して指数関数的に計算時間が増大するが、量子コンピュータを用いることで多項式時間で実行できることが 2005 年に Aspuru-Guzik らによって理論的に示された。その後、様々な実験的・理論的研究が世界各地で進められ、近似的な電子状態をインプットとして用い、対応する電子状態のエネルギーを量子コンピュータ上で高速かつ正確に計算する手法は大幅に進展した。一方で、生体酵素の活性中心などでしばしばみられる多核遷移金属錯体、非線形光学材料や分子スピン量子コンピュータ開発などで重要となる分子内に複数の不対電子を持つ多電子スピン系開殻分子などの電子状態を量子コンピュータ上で効率的に計算するための理論枠組みの創製は未開拓であった。開殻分子は分子内に電子対を作らず孤立して存在する不対電子を持ち、不対電子間に働く磁氣的相互作用が強磁性的か反強磁性的かにより基底状態のスピン量子数が変化する。たとえ同じ分子であってもスピン量子数が異なれば電磁波の吸収波長などの分子物性や化学反応性が異なるため、開殻分子の電子状態を明らかにするには、正しいスピン状態について量子化学計算を行うことや、不対電子間の磁氣的相互作用を特徴付けるパラメータである交換相互作用パラメータを正確に算出することが必要不可欠である。開殻分子は一般的な閉殻一重項分子よりも複雑な電子構造を持ち、その電子状態解明における高精度量子化学計算の果たす役割は非常に大きい。これらの理由から、開殻分子の高精度量子化学計算を量子コンピュータ上で効率的に実行するための新規量子アルゴリズムの開発は非常に重要な研究課題といえる。

2. 研究の目的

本研究では、開殻分子の量子化学計算を量子コンピュータ上で効率的に実行するための新規量子アルゴリズムを開発し、古典コンピュータ上で量子アルゴリズムの数値シミュレーションを実行することで量子アルゴリズムの性能評価を行うことを目的とする。特に、開殻分子において不対電子間の磁氣的相互作用を特徴付ける交換相互作用パラメータ J を、個々の電子状態の全エネルギーを求めることなく直接計算できる新規量子アルゴリズムの開発を行う。本課題を達成するにはスピン二乗演算子 S^2 のもとでの波動関数の時間発展量子シミュレーションを高速かつ高精度に実行する必要があることから、 S^2 演算子にかかわる量子演算に適した新規波動関数マッピング法の開発も進める。様々な原子・分子系について開発した量子アルゴリズムの数値シミュレーションを行い、 J 値の計算精度について調べるとともに、量子ゲート操作回数の見積もり、エラーの影響についても調べ、量子コンピュータ実機での実証実験に向けた知見を得る。

3. 研究の方法

本研究では、原子・分子の波動関数がハミルトニアン H とスピン二乗演算子 S^2 の同時固有関数であることを利用することで、開殻分子の電子状態計算を量子コンピュータ上で効率的に実行するための理論枠組みを創製する。具体的には、以下の課題について検討する。

- (1) スピン二乗演算子 S^2 のもとでの波動関数の時間発展量子シミュレーションを効率的に実行するための新規波動関数マッピング法を開発する。
- (2) 量子コンピュータが計算資源として量子重ね合わせ状態を利用できるという特性を活かし、スピン量子数が異なる複数の電子状態の波動関数の重ね合わせで近似される broken-symmetry 波動関数を用いることで、交換相互作用パラメータ J を直接計算することができる新規量子アルゴリズムを開発する。

これら開発する量子アルゴリズムの動作は、対応する量子サーキット数値シミュレーションプログラムを開発し、ワークステーション上で数値シミュレーションを実行することで検証する。数値シミュレーションプログラムは python 言語を用いて作成し、量子コンピュータでの量子化学計算用ライブラリである OpenFermion と量子サーキットシミュレーション用のライブラリである Cirq を利用する。数値シミュレーションを行うにはハミルトニアンに現れる分子積分が必要となるので、既存の量子化学計算プログラム GAMESS のソースコードを修正し、分子積分に必要な一電子原子積分、二電子原子積分を取得する。原子積分から分子積分へと変換を行うプログラムは自作する。

4. 研究成果

- (1) S^2 演算子にかかわる量子演算に適した新規波動関数マッピング法と任意の波動関数のスピン量子数決定量子アルゴリズムの開発

S^2 演算子のもとでの波動関数の時間発展演算子に対応する量子サーキットを構築し、時間発展量子シミュレーションを実行するには、 S^2 演算子を第二量子化して生成・消滅演算子を用いて定義したあとに Jordan-Wigner 変換や Bravyi-Kitaev 変換などを用いて生成・消滅演算子をパウリ演算子に変換し、対応する量子サーキットを構築するのが一般的な道筋である。ところで、

S^2 演算子のもとでの波動関数の時間発展は、分子軌道の電子占有数は変化させずに電子スピンの向きだけを変化させる。そこで、 S^2 演算子のもとでの時間発展量子シミュレーションに適した新規波動関数マッピング方法として一般化スピン座標マッピング法 (Generalized spin coordinate mapping, GSCM 法) を開発した。 S^2 演算子のもとでの波動関数の時間発展量子シミュレーションに必要な量子ゲート数は、2 個の分子軌道から成る系では、Jordan–Wigner 変換を用いたときには 138 個、Bravyi–Kitaev 変換を用いたときには 78 個であったが、一般化スピン座標マッピング法を用いることで 13 個に削減できることを明らかにした (図 1 左)。さらに、一般化スピン座標マッピング法を用いることで、波動関数の時間発展量子シミュレーションにおける Trotter 分解のエラーを大幅に抑制できることも量子サーキット数値シミュレーションから明らかにした。また、 S^2 演算子のもとでの波動関数の時間発展量子シミュレーションと量子位相推定と組み合わせることで、量子コンピュータ上に保存された任意の波動関数のスピン量子数を決定できる新規量子アルゴリズムを開発した (図 1 右)。

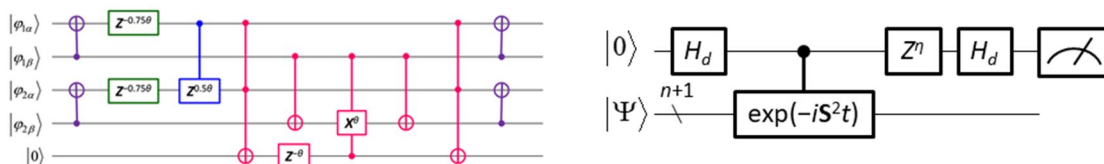


図 1. 一般化スピン座標マッピングを用いたときの S^2 演算子のもとでの波動関数の時間発展量子サーキット(左)と、任意の波動関数のスピン量子数を決定するための量子サーキット(右)

(2) 確率的スピン射影量子アルゴリズムの開発

量子コンピュータは量子重ね合わせ状態や量子絡み合い状態を計算資源として用いることで古典コンピュータでは不可能な計算を可能にするが、量子コンピュータはノイズに弱く、正しい計算結果を得るためには非常に精密な量子状態制御を行わなければならない。また、波動関数の時間発展量子シミュレーションを行うためには、一般に量子サーキット構築時に Trotter 分解という近似を導入する必要がある。Trotter 分解を導入したことによるエラーはたとえ量子コンピュータの性能が向上し、誤り耐性量子計算が達成されても依然として残る。量子コンピュータによる量子化学計算ではこれら計算途中で起きたエラーにより、計算したい電子状態の波動関数とは異なる電子状態の波動関数成分が混入する。このため、例えば閉殻一重項分子の基底状態の計算において、三重項状態の波動関数成分が混入するスピン汚染を引き起こす。このようなスピン汚染された波動関数からスピン汚染源を取り除き、望んでいるスピン量子数を持つ波動関数を得ることは量子コンピュータによる量子化学計算を有用なものにするために必須である。そこで、(1)で開発した任意の波動関数のスピン量子数を決定する量子アルゴリズムを改造し、特定のスピン量子数を持つ波動関数成分を効率的に除去することができる確率的スピン射影法を開発した。確率的スピン射影法の量子サーキットを図 2 に示す。図 1 右に示したスピン量子数決定のための量子サーキットと比較すると、時間発展の長さ t が $\pi/2(s+1)$ に、測定を行う量子ビットに作用する位相シフトゲートの指数 η が $s/2$ になっている。このように設定することで、スピン量子数 $S=s$ の波動関数を量子サーキットの入力で用いたときには測定により必ず $|0\rangle$ 状態が、スピン量子数 $S=s+1$ の波動関数を入力で用いたときには測定により必ず $|1\rangle$ 状態が得られる。スピン汚染された波動関数を入力として用いたときには、量子ビットの測定で $|0\rangle$ 状態が得られれば演算は成功し、スピン汚染源を除去することができる。本手法は量子サーキットの任意の箇所に挿入することができるので、量子位相推定のような非常に長い量子演算の途中で本手法を適用し、スピン汚染源を適宜取り除くことが可能となった。また、本手法は古典コンピュータでの量子化学計算で用いられるスピン消滅演算子を用いた手法よりもスピン汚染除去能力に優れていることも明らかとなった。

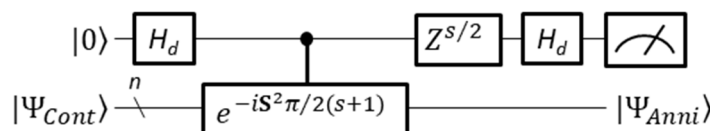


図 2. 確率的スピン汚染除去を行うための量子サーキット

(3) スピン量子数が異なる電子状態間のエネルギー差の直接計算量子アルゴリズムの開発

量子コンピュータは、古典コンピュータでは分子サイズに対して指数関数的に計算量が増加する full-CI 計算を多項式時間で実行することが可能となるが、量子位相推定アルゴリズムは正確には full-CI エネルギーそのものを求める量子アルゴリズムではなく、full-CI 解が存在するエネルギー範囲を求めるアルゴリズムになっており、エネルギー範囲の幅に反比例して計算量が増加する。このため、全エネルギーを細かな桁まで正確に決定しようとする計算コストが非常に

大きくなる。また、ノイズのある中規模量子コンピュータでも実行可能なアルゴリズムとして近年非常に注目を集め、盛んに研究が行われている変分量子固有ソルバー(VQE)は、近似波動関数の生成と測定を繰り返し、エネルギー期待値を統計的に求めるため、測定回数が有限であることに由来する統計誤差の影響が避けられない。特に化学では分子が大きくなると全エネルギーも増加するが、化学反応などで議論したいエネルギー差の大きさは分子サイズにかかわらず同程度という特徴があるため、分子が大きくなるにつれて全エネルギーに対する計算許容誤差を小さくしなければならない。これは VQE において測定回数の急激な増大を引き起こし、大きな分子系への適用が困難となる。このような観点から、量子コンピュータでエネルギー差の直接計算ができれば、巨大分子系への量子コンピュータによる量子化学計算適用の道が拓けると期待される。そこで、量子コンピュータは量子重ね合わせ状態を計算資源として利用していることに注目し、対電子が強磁性的に相互作用した高スピン状態と、反強磁性的に相互作用した低スピン状態の波動関数の重ね合わせで表現される、broken-symmetry 波動関数を利用することで、対電子間の磁氣的相互作用を特徴付ける交換相互作用パラメータ J (図 3 左参照)を直接計算する新規量子アルゴリズム「Bayesian exchange coupling parameter calculator with Broken-symmetry wave function (BxB)」を開発した。BxB 量子アルゴリズムの量子サーキットは図 3 中央に示す。BxB 量子アルゴリズムは、「スピン量子数が異なる電子状態間のエネルギー差を求める問題は、スピン量子数が異なる電子状態の重ね合わせで表現される波動関数が S^2 演算子をペナルティ項として含むシフトしたハミルトニアン $H' = H + jS^2$ の固有関数となるような j を求める問題と等価である」という定理に基づいて設計した。波動関数がハミルトニアン H の固有関数であれば、波動関数をハミルトニアン H のもとで時間発展させても位相が変化するだけで波動関数の形は変わらない。よって、 j を変化させながら波動関数の時間発展を計算し、時間発展前の波動関数からのずれをスワップテストと呼ばれる量子アルゴリズムで評価すると、測定により $|0\rangle$ 状態が得られる確率 $P(0)$ はエネルギー差 ΔE と時間発展の長さ t の積を周期としたコサイン関数で与えられることが分かり、波動関数が H の固有関数に近づくほど測定により $|0\rangle$ 状態が得られる確率 $P(0)$ が高くなる(図 3 右参照)。よって、最初は時間発展の長さ t を短く設定して広いエネルギー範囲で j を探索し、機械学習の一種であるベイズ推定を用いて j を最適化することで、スピン状態間のエネルギー差の直接計算ができる。

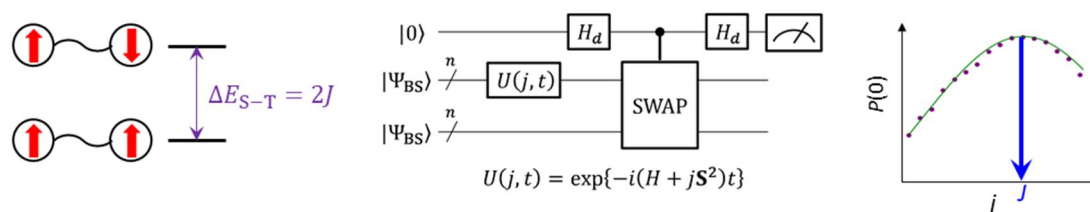


図 3. 2 スピン系における交換相互作用パラメータ J の定義(左)と BxB 量子アルゴリズムの量子サーキット(中央)、 j を変えながら BxB 量子アルゴリズムを適用したときの測定結果の模式図(右)

水素分子の結合解離における一重項–三重項エネルギー差について本手法を適用し、数値シミュレーションを実行したところ、水素原子間距離 $1.2 \text{ \AA} \sim 3.0 \text{ \AA}$ の範囲で J 値を誤差 $0.5 \text{ kcal mol}^{-1}$ (一重項–三重項エネルギー差を誤差 $1.0 \text{ kcal mol}^{-1}$) 以内という非常に高精度に計算できることが明らかとなった(図 4)。このほか、基底三重項状態を持つ原子や小さな分子、窒素分子の三重結合解離などについても数値シミュレーションを実行し、全ての系で J 値を誤差 1 kcal mol^{-1} 以下で求められることを明らかにした。本手法は量子位相推定と同様に古典コンピュータに対する計算の指数加速が保証されているだけでなく、従来法である量子位相推定よりも時間発展の長さ t が $1/10$ 以下となること、時間発展量子シミュレーションをコントロール演算で実行しなくてもよいこと、ノイズ耐性に優れていることなどが明らかとなった。BxB 量子アルゴリズムはベイズ推定を古典コンピュータ上で実行するので、VQE と同じく量子–古典ハイブリッド型アルゴリズムに属するが、VQE とは異なり、分子サイズが大きくなっても計算に必要な測定回数や古典コンピュータ側での計算量が変わらず、巨大分子系にもそのまま適用できる。交換相互作用パラメータ J の計算は非常に小さなエネルギー差を正確に議論しなけ

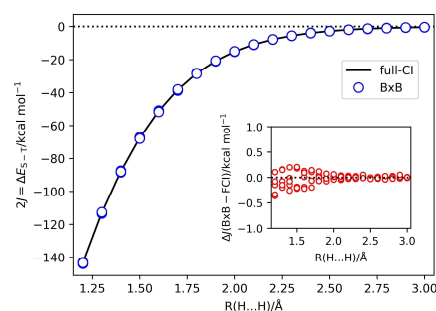


図 4. BxB 量子アルゴリズムを用いた H_2 分子の J 値の数値シミュレーション結果

ればならない問題の典型例であり、量子コンピュータにより多項式時間で J 値の精密計算が可能であることが理論的に示されたことは非常に意義深い。さらに、BxB 量子アルゴリズムは高スピン状態と低スピン状態の重ね合わせで表現される broken-symmetry 波動関数を利用し、ハミルトニアンに加えるペナルティ項として S^2 演算子を用いているが、これらの組み合わせを変えることで、様々なエネルギー差計算への応用も期待される。

(4) BxB 量子サーキットの改良と、量子コンピュータによる垂直イオン化エネルギーの直接計算
 BxB 量子アルゴリズムは full-CI 計算における従来法である量子位相推定よりも計算コストが低く、ノイズ耐性に優れているなどの利点があるが、量子アルゴリズム実装に必要な量子ビット数が量子位相推定の倍程度に増えてしまうという欠点がある。そこで、ハミルトニアン H と S^2 演算子が可換であることを利用し、 S^2 演算子のもとでの波動関数の時間発展量子サーキットの挿入位置を修正することで、BxB 量子アルゴリズムの実装に必要な量子ビット数の大幅削減を行った(図 5)。さらに、BxB 量子アルゴリズムを垂直イオン化エネルギーの直接計算へと応用した。垂直イオン化エネルギーの直接計算を行うには、中性状態の波動関数とイオン化状態の波動関数の重ね合わせ状態を入力として準備する必要があるが、これは、イオン化が起こるスピンの軌道の占有数を保存した量子ビットに対してアダマールゲートを作用させることで達成できる。He から N までの軽元素および HF, BF, CF, CO, O₂, NO, CN, F₂, H₂O, NH₃ に BxB 量子アルゴリズムの数値シミュレーションを実行し、全ての原子・分子で垂直イオン化エネルギーを誤差 0.1 eV 以下という非常に高精度に計算が可能であることを示した。

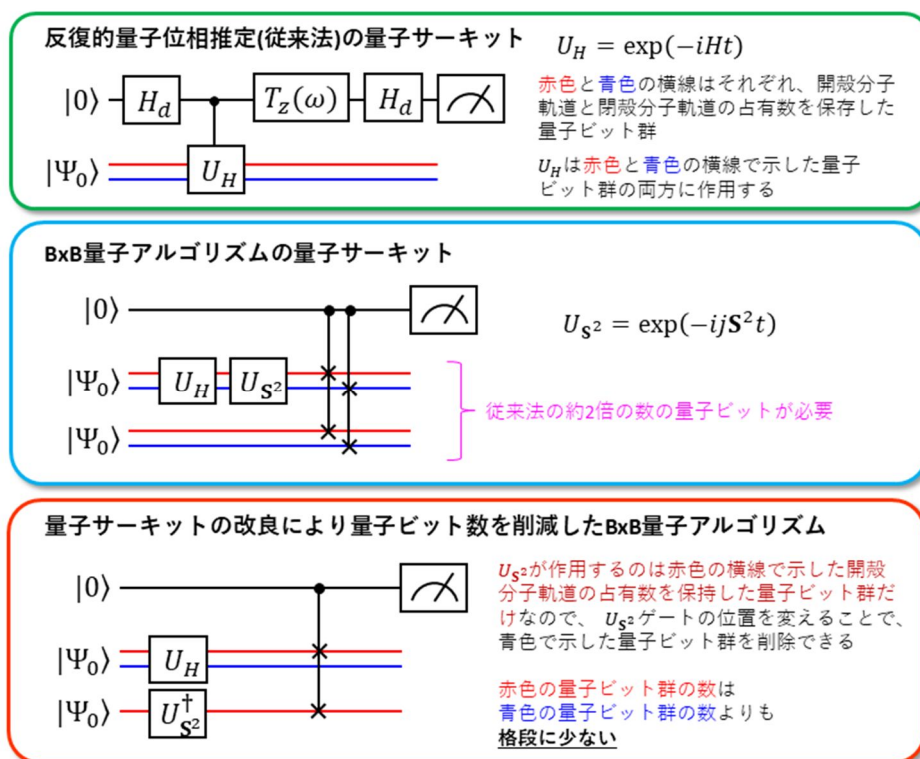


図 5. BxB 量子アルゴリズムのための量子サーキットの改良

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Sugisaki Kenji, Nakazawa Shigeaki, Toyota Kazuo, Sato Kazunobu, Shiomi Daisuke, Takui Takeji	4. 巻 21
2. 論文標題 Quantum chemistry on quantum computers: quantum simulations of the time evolution of wave functions under the S2 operator and determination of the spin quantum number S	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 15356 ~ 15361
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP02546D	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Uchida Kaiji, Cosquer Goulven, Sugisaki Kenji, Matsuoka Hideto, Sato Kazunobu, Breedlove Brian K., Yamashita Masahiro	4. 巻 48
2. 論文標題 Isostructural M(II) complexes (M = Mn, Fe, Co) with field-induced slow magnetic relaxation for Mn and Co complexes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 12023 ~ 12030
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8DT02150C	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sato Kazunobu, Hirao Rei, Timofeev Ivan, Krumkacheva Olesya, Zaytseva Elena, Rogozhnikova Olga, Tormyshev Victor M., Trukhin Dmitry, Bagryanskaya Elena, Gutmann Torsten, Klimavicius Vytautas, Buntkowsky Gerd, Sugisaki Kenji, Nakazawa Shigeaki, Matsuoka Hideto, Toyota Kazuo, Shiomi Daisuke, Takui Takeji	4. 巻 123
2. 論文標題 Trityl-Aryl-Nitroxide-Based Genuinely g-Engineered Biradicals, As Studied by Dynamic Nuclear Polarization, Multifrequency ESR/ENDOR, Arbitrary Wave Generator Pulse Microwave Waveform Spectroscopy, and Quantum Chemical Calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 7507 ~ 7517
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b07169	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Zaytseva Elena, Shiomi Daisuke, Ten Yury, Gatilov Yuri V., Lomanovich Alyona, Stass Dmitri, Bogomyakov Artem, Yu Aixia, Sugisaki Kenji, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Bagryanskaya Elena, Mazhukin Dmitrii	4. 巻 124
2. 論文標題 Magnetic Properties of -Conjugated Hybrid Phenoxy-Nitroxide Radicals with Extended -Spin Delocalization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 2416 ~ 2426
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b11856	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Nakazawa Shigeaki, Kanno Tomomi, Sugisaki Kenji, Kameya Hiromi, Matsui Miki, Ukai Mitsuko, Sato Kazunobu, Takui Takeji	4. 巻 266
2. 論文標題 Fe-transferrins or their homologues in ex-vivo mushrooms as identified by ESR spectroscopy and quantum chemical calculations: A full spin-Hamiltonian approach for the ferric sextet state with intermediate zero-field splitting parameters	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Food Chemistry	6. 最初と最後の頁 24 ~ 30
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.foodchem.2018.05.092	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Bonanno Nico M., Poddutoori Prashanth K., Sato Kazunobu, Sugisaki Kenji, Takui Takeji, Lough Alan J., Lemaire Martin T.	4. 巻 24
2. 論文標題 Reversible Solution -Dimerization and Long Multicenter Bonding in a Stable Phenoxy Radical	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 14906 ~ 14910
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201802204	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yamane Takeshi, Sugisaki Kenji, Matsuoka Hideto, Sato Kazunobu, Toyota Kazuo, Shiomi Daisuke, Takui Takeji	4. 巻 47
2. 論文標題 ESR analyses of picket fence MnII and 6th ligand coordinated FeIII porphyrins (S = 5/2) and a Coll(hfac) complex (S = 3/2) with sizable ZFS parameters revisited: a full spin Hamiltonian approach and quantum chemical calculations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 16429 ~ 16444
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8dt02988a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sugisaki Kenji, Yamamoto Satoru, Nakazawa Shigeaki, Toyota Kazuo, Sato Kazunobu, Shiomi Daisuke, Takui Takeji	4. 巻 1
2. 論文標題 Open shell electronic state calculations on quantum computers: A quantum circuit for the preparation of configuration state functions based on Serber construction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters: X	6. 最初と最後の頁 100002 ~ 100002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpltx.2018.100002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Sugisaki Kenji, Nakazawa Shigeaki, Toyota Kazuo, Sato Kazunobu, Shiomi Daisuke, Takui Takeji	4. 巻 5
2. 論文標題 Quantum Chemistry on Quantum Computers: A Method for Preparation of Multiconfigurational Wave Functions on Quantum Computers without Performing Post-Hartree-Fock Calculations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Central Science	6. 最初と最後の頁 167 ~ 175
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscentsci.8b00788	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

[学会発表] 計45件 (うち招待講演 13件 / うち国際学会 29件)

1. 発表者名 杉崎研司
2. 発表標題 量子コンピュータによる量子化学計算の現状と展望
3. 学会等名 CBI学会第406回研究講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 杉崎研司、中澤重顕、豊田和男、佐藤和信、塩見大輔、工位武治
2. 発表標題 量子コンピュータ上での波動関数のスピン量子数決定法
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kenji Sugisaki, Shigeaki Nakazawa, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Takeji Takui
2. 発表標題 Quantum chemical calculations on quantum computers: Determination of the spin quantum number S of arbitrary wave functions on quantum computers
3. 学会等名 The 6th Awaji International Workshop on "Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kenji Sugisaki
2. 発表標題 Quantum Chemistry of Open Shell Molecules on Quantum Computers
3. 学会等名 Workshop on Selected Topics in Quantum Computation and Quantum Information (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 杉崎研司
2. 発表標題 高スピン開殻系の磁氣的性質の量子化学計算手法及び量子コンピュータ量子アルゴリズムの開発
3. 学会等名 第58回電子スピンサイエンス学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 杉崎研司、中澤重顕、豊田和男、佐藤和信、塩見大輔、工位武治
2. 発表標題 量子コンピュータによる量子化学計算：スピン演算子による波動関数の時間発展量子シミュレーション
3. 学会等名 第58回電子スピンサイエンス学会年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kenji Sugisaki, Shigeaki Nakazawa, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Takeji Takui
2. 発表標題 Quantum simulations with the electron spin operators and applications to the determination of spin quantum numbers of wave functions
3. 学会等名 The 13th Japanese-Russian Workshop on "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kenji Sugisaki, Shigeaki Nakazawa, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Takeji Takui
2. 発表標題 Toward quantum chemical calculations of open shell molecules on quantum computers
3. 学会等名 ACS Spring 2020 National Meeting & Expo in Philadelphia (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kenji Sugisaki, Shigeaki Nakazawa, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Takeji Takui
2. 発表標題 Multi-configurational quantum chemistry on quantum computers
3. 学会等名 ACS Spring 2020 National Meeting & Expo in Philadelphia (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kenji Sugisaki, Shigeaki Nakazawa, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Takeji Takui
2. 発表標題 Quantum chemistry of open shell molecules on quantum computers: Development of the quantum algorithm for the determination of spin quantum number of arbitrary wave functions
3. 学会等名 The 23rd Annual Conference on Quantum Information Processing (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 杉崎研司、中澤重顕、豊田和男、佐藤和信、塩見大輔、工位武治
2. 発表標題 量子コンピュータによる開殻分子のFull-CI計算に向けて：多配置波動関数の効率的生成法
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sugisaki Kenji、Yamamoto Satoru、Nakazawa Shigeaki、Toyota Kazuo、Sato Kazunobu、Shiomi Daisuke、Takui Takeji
2. 発表標題 Implementation of Quantum Algorithms for Quantum Chemical Calculations on Quantum Computers: Full-CI for Open Shell Molecules
3. 学会等名 7th JCS Symposium (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yamane Takeshi、Sugisaki Kenji、Sato Kazunobu、Toyota Kazuo、Shiomi Daisuke、Takui Takeji
2. 発表標題 Conventional ESR Analyses of Sizable ZFS Tensors in Such as Picket Fence MnII and 6th Ligand Coordinated FeIII Porphyrins (S = 5/2) and a Typical CoII Complex (S = 3/2) : Fictitious Spin-1/2 vs. Full Spin Hamiltonian Approaches
3. 学会等名 7th JCS Symposium (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sugisaki Kenji、Horie Keita、Toyota Kazuo、Sato Kazunobu、Shiomi Daisuke、Tretyakov Evgeny、Takui Takeji
2. 発表標題 Electronic Structures of Ferrocenium Ions with 1,3-Diazetidine-2,4-diimine Bridge: A Theoretical Study
3. 学会等名 The III International Conference "Spin physics, spin chemistry and spin technology" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sato Kazunobu、Yamamoto Satoru、Shibata Taiki、Hirao Rei、Tanimoto Keigo、Sugisaki Kenji、Nakazawa Shigeaki、Hosseini Elham、Maruyama Koji、Toyota Kazuo、Shiomi Daisuke、Ivanov Konstantin、Morita Yasushi、Takui Takeji
2. 発表標題 Molecular Spin Technology based on Arbitrary Microwave Excitations for Quantum Control
3. 学会等名 The III International Conference "Spin physics, spin chemistry and spin technology" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yamane Takeshi、Sugisaki Kenji、Matsuoka Hideto、Sato Kazunobu、Toyota Kazuo、Shiomi Daisuke、Takui Takeji
2. 発表標題 Generalized geff-gtrue relationships bridging between putative fictitious spin-1/2 and full spin Hamiltonian approaches: Conventional ESR spectral analyses of sizable ZFS tensors in such as picket fence MnII and 6th ligand coordinated FeIII porphyrins (S = 5/2) and a typical Coll complex (S = 3/2)
3. 学会等名 The III International Conference "Spin physics, spin chemistry and spin technology" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Nakazawa Shigeaki、Hirai Katsuyuki、Sugisaki Kenji、Miyahara Ikuko、Kitagawa Toshikazu、Sato Kazunobu、Takui Takeji
2. 発表標題 A room-temperature stable triplet carbene as a unit of a high-spin quantum computer, as studied by single-crystal ESR spectroscopy and quantum chemical calculations
3. 学会等名 The III International Conference "Spin physics, spin chemistry and spin technology" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Matsui Hiroki、Matsuoka Hideto、Sugisaki Kenji、Toyota Kazuo、Sato Kazunobu、Shiomi Daisuke、Tanaka Nobuaki、Suzuki Shuichi、Okada Keiji、Takui Takeji
2. 発表標題 Effects of π -conjugation connectivity on electronic structures of organic triplet states as studied by ESR and quantum chemical calculations
3. 学会等名 The III International Conference "Spin physics, spin chemistry and spin technology" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sakiyama Dan、Tatsumi Shunsuke、Sugisaki Kenji、Sato Kazunobu、Matsuoka Hideto、Toyota Kazuo、Shiomi Daisuke、Kumar Sharvan、Kumar Keshri Sudhir、Kumar Yogendra、Mukhopadhyay Pritam、Takui Takeji
2. 発表標題 Electronic structures of stable naphthalene diimide derivatives with phosphonium groups by ESR spectroscopy
3. 学会等名 The III International Conference "Spin physics, spin chemistry and spin technology" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tanaka Koudai, Matsuoka Hideto, Bagryanskaya Irina, Gurskaya Larisa, Tretyakov Evgeny, Sugisaki Kenji, Takui Takeji, Sato Kazunobu
2. 発表標題 An ESR study on the electronic state of a nitroxide diradical with a ferrocen-1,1'-diyl-substituted 1,3-diazetidone-2,4-diimine coupler
3. 学会等名 The III International Conference "Spin physics, spin chemistry and spin technology" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sugisaki Kenji, Nakazawa Shigeaki, Toyota Kazuo, Sato Kazunobu, Shiomi Daisuke, Takui Takeji
2. 発表標題 Quantum chemical calculations of open shell molecules on quantum computers: Efficient preparation methods of initial guess wave functions
3. 学会等名 12th Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tanaka Koudai, Matsuoka Hideto, Bagryanskaya Irina, Gurskaya Larisa, Tretyakov Evgeny, Sugisaki Kenji, Takui Takeji, Sato Kazunobu
2. 発表標題 An electronic state of a nitroxide diradical with a ferrocen-1,1'-diyl-substituted 1,3-diazetidone-2,4-diimine coupler as studied by ESR spectroscopy
3. 学会等名 12th Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sakiyama Dan, Tatsumi Shunsuke, Sugisaki Kenji, Sato Kazunobu, Matsuoka Hideto, Toyota Kazuo, Shiomi Daisuke, Kumar Sharvan, Kumar Keshri Sudhir, Kumar Yogendra, Mukhopadhyay Pritam, Takui Takeji
2. 発表標題 An ESR Study of stable naphthalene diimide derivatives with phosphonium groups
3. 学会等名 12th Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Matsui Hiroki, Matsuoka Hideto, Sugisaki Kenji, Toyota Kazuo, Sato Kazunobu, Shiomi Daisuke, Tanaka Nobuaki, Suzuki Shuichi, Okada Keiji, Takui Takeji
2. 発表標題 ESR and quantum chemical investigations of electronic structures of organic triplet states affected by π -conjugation connectivity
3. 学会等名 12th Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sato Kazunobu, Yamamoto Satoru, Shibata Taiki, Hirao Rei, Tanimoto Keigo, Sugisaki Kenji, Nakazawa Shigeaki, Hosseini Elham, Maruyama Koji, Toyota Kazuo, Shiomi Daisuke, Ivanov Konstantin, Morita Yasushi, Takui Takeji
2. 発表標題 Molecular Spin Manipulations by Arbitrary Microwave Excitation Technology for Optimal Quantum Control
3. 学会等名 12th Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Nakazawa Shigeaki, Kanno Tomomi, Kameya Hiromi, Matsui Miki, Ukai Mitsuko, Sato Kazunobu, Takui Takeji
2. 発表標題 Metalloproteins in mushrooms as identified by ESR spectroscopy and quantum chemical calculations
3. 学会等名 12th Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yamane Takeshi, Sugisaki Kenji, Sato Kazunobu, Toyota Kazuo, Shiomi Daisuke, Takui Takeji
2. 発表標題 Conventional ESR analyses of sizable ZFS tensors in such as picket fence MnII and 6th ligand coordinated FeIII porphyrins ($S = 5/2$) and a typical CoII complex ($S = 3/2$): Putative fictitious spin-1/2 vs. full spin Hamiltonian approaches
3. 学会等名 12th Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Matsuoka Hideto, Matsui Hiroki, Olav Schiemann, Sugisaki Kenji
2. 発表標題 Time-resolved EPR, optical, and quantum chemical studies of pi-conjugated phenazine derivatives
3. 学会等名 The Third Joint Conference of the Asia-Pacific EPR/ESR Society and The International EPR (ESR) Society (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sugisaki Kenji, Yamamoto Satoru, Nakazawa Shigeaki, Toyota Kazuo, Sato Kazunobu, Shiomi Daisuke, Takui Takeji
2. 発表標題 Quantum chemical calculations of open shell molecules on quantum computers: Efficient construction methods of the open shell wave functions
3. 学会等名 The Third Joint Conference of the Asia-Pacific EPR/ESR Society and The International EPR (ESR) Society (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sato Kazunobu, Yamamoto Satoru, Shibata Taiki, Hirao Rei, Tanimoto Keigo, Sugisaki Kenji, Nakazawa Shigeaki, Hosseini Elham, Maruyama Koji, Toyota Kazuo, Shiomi Daisuke, Ivanov Konstantin, Morita Yasushi, Takui Takeji
2. 発表標題 Spin manipulation by arbitrary microwave excitation for molecular quantum control
3. 学会等名 The Third Joint Conference of the Asia-Pacific EPR/ESR Society and The International EPR (ESR) Society (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takui Takeji, Yamane Takeshi, Sugisaki Kenji, Matsuoka Hideto, Sato Kazunobu, Toyota Kazuo, Shiomi Daisuke
2. 発表標題 Conventional ESR analyses of sizable ZFS tensors in metal ionic high spin systems in harmony with quantum chemical calculations: Applications to some important high spin metallocomplexes
3. 学会等名 The Third Joint Conference of the Asia-Pacific EPR/ESR Society and The International EPR (ESR) Society (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 杉崎研司
2. 発表標題 量子コンピュータによる開殻分子の量子化学計算
3. 学会等名 第5回電子状態理論シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 杉崎研司、中澤重顕、豊田和男、佐藤和信、塩見大輔、工位武治
2. 発表標題 量子コンピュータによる開殻分子の量子化学計算に向けて：複数の配置から成る波動関数の効率的生成法
3. 学会等名 第57回電子スピンサイエンス学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中澤重顕、平井克幸、杉崎研司、宮原郁子、松岡秀人、北川敏一、佐藤和信、工位武治
2. 発表標題 量子ビットとしての安定三重項カルベンの分子構造とゼロ磁場分裂定数のESR及び量子化学計算による研究
3. 学会等名 第57回電子スピンサイエンス学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松井大樹、杉崎研司、Schiemann Olav、佐藤和信、松岡秀人
2. 発表標題 ピリジンおよびベンゼンが縮環したフェナジンの時間分解EPRおよび発光測定
3. 学会等名 第57回電子スピンサイエンス学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松岡秀人、松井大樹、Schiemann Olav、杉崎研司
2. 発表標題 縮環フェナジン類における 共役ネットワークと発光の相関
3. 学会等名 第57回電子スピンサイエンス学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 崎山弾、巽俊輔、杉崎研司、佐藤和信、豊田和男、塩見大輔、Kumar Sharvan、Kumar Keshri Sudhir、Kumar Yogendra、Mukhopadhyay Pritam、工位武治
2. 発表標題 ホスホニウム基を有する安定なナフタレンジイミドの電子構造とダイナミクスの研究
3. 学会等名 第57回電子スピンサイエンス学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田中滉大、松岡秀人、杉崎研司、Bagryanskaya Irina、Gurskaya Larisa、Tretyakov Evgeny、工位武治、佐藤和信
2. 発表標題 ESR法を用いたフェロセン置換型1,3-ジアゼチジン-2,4-ジイミンで架橋されたニトロキシドピラジカルの電子状態の研究
3. 学会等名 第57回電子スピンサイエンス学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sugisaki Kenji
2. 発表標題 Quantum chemical calculations of open shell systems on quantum computers
3. 学会等名 Perspectives of Quantum Computing in Kyoto (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 杉崎研司
2. 発表標題 量子コンピュータを用いた量子化学計算と開殻電子構造への応用
3. 学会等名 第25回関西量子情報Student Chapter (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sugisaki Kenji
2. 発表標題 Quantum Chemical Calculations on Quantum Computers -Applications to Open Shell Electronic Structures
3. 学会等名 Workshop on Recent Trends in Electronic Structure of Atoms and Molecules (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 杉崎研司
2. 発表標題 量子コンピュータによる開殻分子のFull-CI計算
3. 学会等名 近畿化学協会コンピュータ化学部会 (第104例会) 公開講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中滉大、松岡秀人、杉崎研司、Bagryanskaya Irina、Gurskaya Larisa、Tretyakov Evgeny、工位武治、佐藤和信
2. 発表標題 フェロセン置換型1,3-ジアゼチジン-2,4-ジイミンで架橋されたニトロキシドピラジカルの多周波ESRスペクトルと電子構造
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 杉崎研司、中澤重顕、豊田和男、佐藤和信、塩見大輔、工位武治
2. 発表標題 量子コンピュータによる開殻分子の量子化学計算：スピン座標マッピングの拡張
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Sugisaki Kenji
2. 発表標題 Studies of spin properties of open shell molecules on quantum computers
3. 学会等名 The 6th International Workshop on Quantum Chemistry/Quantum Chemical Calculations on Quantum Computers: Quantum Algorithms 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 杉崎 研司	4. 発行年 2020年
2. 出版社 講談社	5. 総ページ数 160
3. 書名 量子コンピュータによる量子化学計算入門	

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 量子情報処理装置及び量子情報処理方法	発明者 杉崎研司、佐藤和信、工位武治	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2020-31512	出願年 2020年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔その他〕

量子コンピュータを化学研究に役立てるための鍵となる手法を開発！
<https://www.osaka-cu.ac.jp/ja/about/pr/press/2019/190704>
量子コンピュータにおける量子ビットのモデルとなる新奇的なピラジカルの開発
<https://www.osaka-cu.ac.jp/ja/about/pr/press/2019/190821-2>
「スピン汚染」を効率的に取り除く新規量子アルゴリズムの開発に成功！
<https://www.osaka-cu.ac.jp/ja/news/2020/200917-2>
スピン状態間のエネルギー差を直接求めることができる新規量子アルゴリズムの開発に成功！
<https://www.osaka-cu.ac.jp/ja/news/2020/201225>
化学研究に役立つ量子アルゴリズム～原子・分子のイオン化エネルギーを量子コンピュータで直接計算する手法を開発！～
<https://www.osaka-cu.ac.jp/ja/news/2020/210317-1>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------