

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 6 月 6 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2021～2022

課題番号：21K18903

研究課題名（和文）高強度レーザー場中の多電子ダイナミクスの量子・古典ハイブリッド計算

研究課題名（英文）Quantum/Classical hybrid simulations of multielectron dynamics in intense laser fields

研究代表者

佐藤 健（Sato, Takeshi）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・准教授

研究者番号：30507091

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000 円

研究成果の概要（和文）：光と物質の相互作用で最初に光を吸収するのは電子であり、その後、電子から原子核へのエネルギー移動によってさまざまな光反応が起こる。2018年ノーベル物理学賞受賞のレーザー技術に基づくアト秒科学は、この電子ダイナミクスの直接観察と直接制御を目指す。その実現には高強度レーザー場中の多電子ダイナミクスの信頼できる計算方法が必要だが、量子多体系特有の組み合わせ爆発の問題が伴う。本研究では、高強度レーザー場中の多電子ダイナミクスのための量子/古典ハイブリッドアルゴリズムである時間依存ユニタリー結合クラスター法の開発に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では多体量子情報は量子コンピュータで、一体量子情報は古典コンピュータで扱う時間依存量子・古典ハイブリッド計算を実現した。これはNISQ量子コンピュータを現実的かつトリビアルでない問題に適用するための鍵となる。長期的展望として、本研究結果によってアト秒科学の最終目標である電子運動の直接観測・直接制御が達成されれば、例えば、円偏光高次高調波スペクトロスコピーによるキラル分子の識別等が期待でき、生命科学、化学産業、製薬産業にまで革新的なインパクトを与えると予想される。

研究成果の概要（英文）：In the light-matter interaction, the photon energy is first absorbed by electrons, which is then followed by various photoreactions through the energy transfer from electrons to nuclei. Attosecond science, which is based on the 2018 Nobel Prize-winning laser technology, is targeting the direct observation and control of such electron dynamics. Achieving this world-changing goal requires reliable calculation methods of intense laser-driven multielectron dynamics, which, however, suffers from the problem of combinatorial explosion peculiar to quantum many-body systems. In this work we developed a novel quantum computer/classical computer hybrid algorithm to simulate intense-laser driven multielectron dynamics called time-dependent unitary coupled-cluster method.

研究分野：量子物理

キーワード：量子コンピュータ 量子ダイナミクス 時間依存結合クラスター法

1. 研究開始当初の背景

光と物質の相互作用で最初に光を吸収するのは電子であり、その後、電子から原子核へのエネルギー移動によってさまざまな光反応が起こる(図1)。2018年ノーベル物理学賞受賞のレーザー技術に基づくアト秒科学は、この電子ダイナミクスの直接観察と直接制御を目指す。その実現には高強度レーザー場中の多電子ダイナミクスの信頼できる計算方法が必要だが、量子多体系特有の組み合わせ爆発の問題が適用を阻んでいた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、高強度レーザー場中の多電子ダイナミクスのための、NISQ量子コンピュータを用いた量子/古典ハイブリッドアルゴリズムを開発することである。

3. 研究の方法

非相対論的電子ダイナミクスは、時間依存シュレーディンガー方程式(TDSE)によって正確に記述されるが、TDSEは2電子系までしか解けない。そこで応募者らは多電子系のTDSEを近似的に解くために、TD-CASSCF(時間依存完全活性空間自己無撞着場)やTD-OCC(時間依存最適化結合クラスター法)などの理論と計算法を開発してきた。これらの方法では、全波動関数が一電子軌道からなるスレーター行列式で展開され、展開係数 C と軌道関数 ψ の両方が時間発展する(図2)。

系の電子はアクティブ電子とコア電子に柔軟に分類され、アクティブ電子のみをアクティブ軌道空間内で関連させる。従来の実装では C と ψ の両方を古典コンピュータで計算するため、 C の次元が電子数に対して指数関数的に増加する(組み合わせ爆発)という深刻な問題があった。本研究では、組み合わせ爆発の問題を回避するための量子/古典ハイブリッドアルゴリズムを提案する。つまり、時間依存ユニタリ結合クラスター(TD-UCC)近似に基づき、 C は量子コンピュータで、 ψ は古典コンピュータで解く。

4. 研究成果

TD-UCC法の開発に成功した。具体的には、代表者がこれまでに開発してきた古典コンピュータプログラムにおいて、展開係数(C モジュール)と軌道(ψ モジュール)の実装は高レベルに独立で互いに隠蔽されているが、TD-UCCの量子コンピュータアルゴリズムを新たな C モジュールの一つとして実装した。これを原子

Light irradiation → Electron motion → Nuclear motion

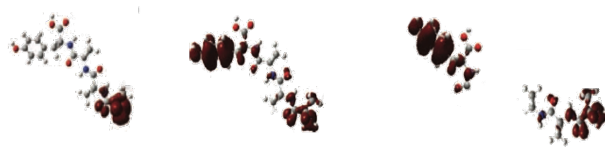


図1: 光生命反応最初期課程

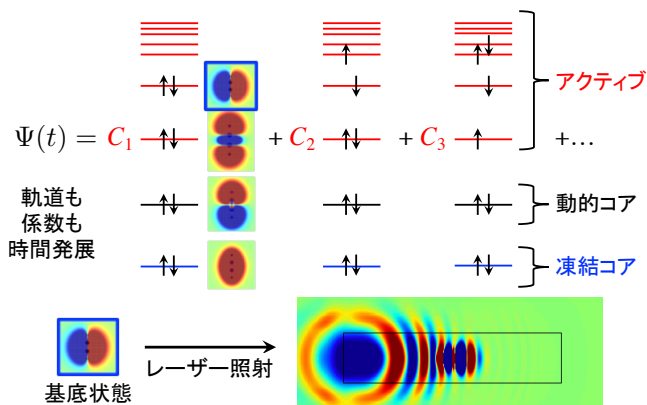


図2: 波動関数表現の模式図。展開係数 C だけでなく軌道関数 ψ (図中の水平線)も時間発展する。下図は、エチレン分子のシミュレーションにおけるレーザーパルス照射前(左)と照射後(右)のひとつの軌道関数の実部。

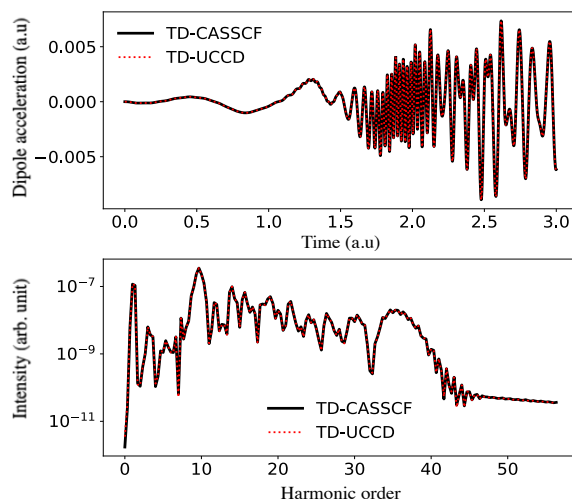


図3: 中心波長 800 nm、ピーク強度 2×10^{14} の高強度近赤外パルス照射時の一次元 He モデル原子の双極子加速度の時間変化(上)および高次高調波スペクトル(下)。古典コンピュータ上の TD-CASSCF 計算(正確なベンチマーク計算)と量子・古典ハイブリッド計算による(量子部分はエミュレータを利用) TD-UCC 計算の結果の比較。両者の良好な一致を示している。

に特化した ψ モジュールおよび二原子分子に特化した ψ モジュールとそれぞれ組み合わせることにより、原子および二原子分子の計算を可能とした。これを用いて、まず、古典コンピュータ上で動作する量子回路エミュレータ(以下「エミュレータ」)を使用して数値評価を行い、He原子で正確な多電子ダイナミクスシミュレーションが可能であることを示した(図3)。次にIBM Q System Oneを使用した実機計算においてもヘリウム原子からの高次高調波発生のシミュレーションに成功した。

本研究では多体量子情報は量子コンピュータで、一体量子情報は古典コンピュータで扱う時間依存量子・古典ハイブリッド計算を実現した。これはNISQ量子コンピュータを現実的かつトリビアルでない問題に適用するための鍵となる。長期的展望として、本研究成果によってアト秒科学の最終目標である電子運動の直接観測・直接制御が達成されれば、例えば、円偏光高次高調波スペクトロスコピーによるキラル分子の識別等が期待でき、生命科学、化学産業、製薬産業にまで革新的なインパクトを与えると予想される。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Nobuyuki Yoshioka, Takeshi Sato, Yuya O. Nakagawa, Yu-ya Ohnishi, and Wataru Mizukami	4. 巻 4
2. 論文標題 Open Access Variational quantum simulation for periodic materials	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Phys. Rev. Research	6. 最初と最後の頁 013052/1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.4.013052	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 W. Auzinger, I. Brezinova, A. Grosza, Harald Hofstattera, Othmar Koch, and T. Sato	4. 巻 1
2. 論文標題 Efficient adaptive exponential time integrators for nonlinear Schrodinger equations with nonlocal potential	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Coump. Math. Data Sci.	6. 最初と最後の頁 100014/1-22
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.jcmds.2021.100014	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 Yang Li, Takeshi Sato, and Kenichi L. Ishikawa	4. 巻 104
2. 論文標題 Implementation of a time-dependent multiconfiguration self-consistent-field method for coupled electron-nuclear dynamics in diatomic molecules driven by intense laser pulses	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Phys. Rev. A	6. 最初と最後の頁 043104/1-16
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.104.043104	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 H. Pathak, T. Sato, and K. L. Ishikawa	4. 巻 154
2. 論文標題 Time-dependent optimized coupled-cluster method for multielectron dynamics IV: Approximate consideration of the triple excitation amplitudes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 234104/1-12
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/5.0054743	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 Y. Orimo, O. Tugs, D. You, K. Ueda, T. Sato, and K. L. Ishikawa	4. 巻 54
2. 論文標題 Interferometric extraction of photoionization-path amplitudes and phases from time-dependent multiconfiguration self-consistent-field simulations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.	6. 最初と最後の頁 074001/1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6455/abe67e	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 -

〔学会発表〕 計2件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Takeshi Sato
2. 発表標題 Explicitly time-dependent wavefunction-based methods for intense laser-driven multielectron dynamics
3. 学会等名 Pacifichem 2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takeshi Sato
2. 発表標題 Simulations of strong laser-driven multielectron dynamics using classical and quantum computers
3. 学会等名 The Asian international symposium 102nd CSJ annual meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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
---------	---------