

# 量子コンピューターでヒュッケル分子軌道計算

## 東大 エラー抑制手法採用で高精度に

東京大学大学院理学系研究科の吉田龍平大学院生、ローツステッド・エリック准教授、山内薫教授らの研究グループは、量子コンピューター `ibm_kawasaki` を用いて、エチレン、1、3-ブタジエン、ベンゼンなどの基本的な分子の分子軌道のエネルギーを最も単純な分子軌道法で

を起こすため、計算結果を補正する必要がある。具体的なシステムでは、量子コンピューターを使って計算し、量子コンピューターがどれだけ役に立つかを示すことである。

今回、量子計算のエラーに伴って生成する物理的に意味を持たない状態を捨てるという最も単純なエラー抑制（量子ゲートの演算におけるエラーを修正する手法）を取り入れることによって、軌道エネルギーを高い確度、かつ高い精度で求めることができることを示した。この手法は極めて一般的であるため、フラレン、グラフェン、カーボンナノチューブなどの大きな $\pi$ 共役系の電子状態を瞬時にして量子コンピューターによって求めるための指針を与えるものとなった。

あるヒュッケル分子軌道法によって計算した。その結果、量子計算のエラーに伴って生成する物理的に意味を持たない状態を捨てるという誤り補正を行えば、高い確度と精度で軌道エネルギーを求められることを示した。

研究グループは、東京大学量子イニシアティ

山内教授の話「量子コンピューターのハードウェアの技術発展によって誤りの確率が下がるにつれ、量子コンピューターによる計算が意味のあるものとなる対象がますます広がると予想されます。その技術発展を最大限に活用し、例えば、フラレンやカーボンナノチューブなどの大規模なシステムの量子計算に取り組んでいくことが次のステップです」

■ヒュッケル分子 1930年にドイツの物理化学者エーリヒ・ヒュッケルによって提案された分子軌道法。 $\pi$ 共役系分子の分子軌道およびそのエネルギーを記述できる。分子軌道を炭素原子の原子軌道の重ね合わせとし炭素原子一つにつき一つのP軌道のみを考慮している。またクーロン積分と共鳴積分の値はそれぞれ $\alpha$ 、 $\beta$ として分子内で同じ値と仮定する。

ブにおいてDICの支援の下、Qubit（量子ビット）による応用量子化学プロジェクト(AQUA BIT)を推進し、分子系の計算を量子コンピューターによって行うための方法論の開発および量子コンピューターによる計算結果の誤り抑制による計算確度の向上に取り組んできた。

理想的な量子コンピューターを使えば、これまでできなかった規模の計算が瞬時にできる。ただ、現時点では、量子コンピューターは誤り