

**Natural-expansion ansatz と量子コンピュータを用いた
高強度レーザーパルス下の多電子系の第一原理シミュレーション II**
**First principles simulation of multielectron systems under intense laser field
using quantum computer and natural-expansion ansatz II**

東大院工¹, IBM Quantum² °魏博紀¹, 石川顕一¹, 川島雪生², Tanvi Gujarati², 佐藤健¹,
The Univ. of Tokyo¹, IBM Quantum², °Hiroki Gi¹, Kenichi L. Ishikawa¹, Yukio Kawashima², Tanvi
Gujarati², Takeshi Sato¹

E-mail: gi-hiroki139@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

高次高調波発生は高強度フェムト秒レーザーパルスを物質に照射することで発生する現象であり、発生する高調波はアト秒スケールの物理現象の観測に用いられる。高次高調波を計算するためには電子ダイナミクスを計算する必要がある我々の研究室では様々な手法を開発してきた[1]。時間依存多電子波動関数理論の一つである MCTDHF 法(Multi Configuration Time-dependent Hartree-Fock)[2,3]は時間に依存した軌道関数をすべて用いた電子配置を考慮するため、電子相関を厳密にとりこみ与えられた軌道の中で厳密解を与えるが電子数に対して指数関数的に計算コストが上昇してしまう。そこで我々は近年注目されている量子コンピュータを用いて、電子数に対して古典コンピュータ上では指数関数時間かかるが、量子コンピュータ上では多項式時間で計算可能な時間依存・軌道最適化ユニタリー結合クラスター法(TD-OUCC)法を開発した。少数の空間軌道を用いたシミュレーションはうまくいったが、軌道数を増やすと TD-OUCC 法は急激に量子回路が深くなり、ノイズが存在する量子コンピュータ実機ではエラーが蓄積し有益な計算結果が得られなかった [4]。この問題を解決するため、自然展開法に基づいた波動関数を量子回路に組み込んだ Natural-expansion ansatz を開発し、回路長を大幅に削減することに成功しより多くの空間軌道を用いた高次高調波発生の正確なシミュレーションに成功した。これまでは一次元モデル原子を対象に計算を行ってきたが[5]、本研究で現実の三次元ハミルトニアンに基づく多電子原子のシミュレーションに拡張した。発表では理論と実装の概要、He 原子および Be 原子からの高次高調波発生シミュレーション結果について報告する。

[1] T. Sato, et al, *Can. J. Chem.*, **101** 698 (2023).

[2] T. Kato and H. Kono, *Chem. Phys. Lett.* **392**, 533 (2004).

[3] J. Caillat, et al, *Phys. Rev. A*, **71**, 012712 (2005).

[4] 魏博紀 他, 第83回応用物理学会秋季学術講演会, 23p-C206-3 (2022).

[5] 魏博紀 他, 第84回応用物理学会秋季学術講演会, 23a-B204-3 (2023).