

三体力を含む原子核ハミルトニアンの 基底エネルギーの量子計算

チーム名：量子4体系

伊藤 律稀, Deng Zhihao, 竹澤 嶺, 西田 秀之

導入～原子核における三体力の重要性～

三体力 – 3つの核子が同時に相互作用する効果

Ex) 軽核(^3H , ^4He)の基底エネルギー

	実験値[MeV]	二体力のみ[MeV]	三体力含む[MeV]
^3H (トリチウム)	8.48	~7.6	~8.5
^4He (アルファ粒子)	28.3	~25.4	~28.4

Steven C. Pieper et al.(2001)
J. Carlson et al.(2015)

三体力は行列要素が急激に増加 → 計算・メモリ・保存コストの増大
量子コンピュータであれば、現実的な時間で計算可能
→ 有用な量子計算アルゴリズムを試す(VQE, QPE, 量子Krylov部分空間法)

吉田聰太氏の原子核夏の学校講義資料を参考に進めた

https://sotayoshida.github.io/Lecture_SummerSchool2025/home.html

問題設定

$$H = \sum_{pq} \epsilon_q^p a_p^\dagger a_q + \frac{1}{4} \sum_{pqrs} V_{rs}^{pq} a_p^\dagger a_q^\dagger a_s a_r \\ + \frac{1}{36} \sum_{pqrsuv} W_{suv}^{pqr} a_p^\dagger a_q^\dagger a_r^\dagger a_v a_u a_s$$

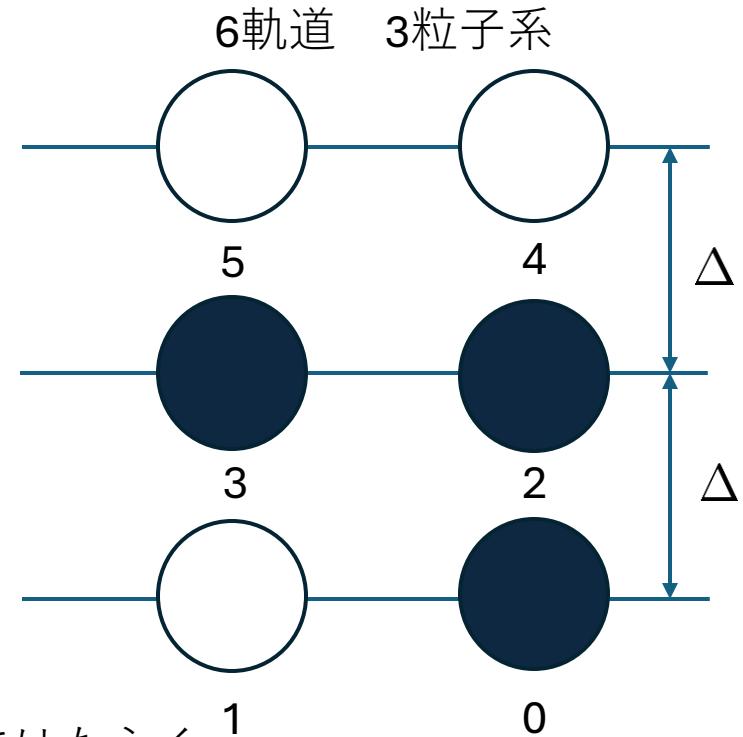
モデルの簡単化

エネルギー準位は等間隔 Δ

1体項：対角項のみ

2体項：2重縮退があるときのみ定数Vではたらく

3体項：粒子が3連続軌道にあるときのみ定数Wではたらく



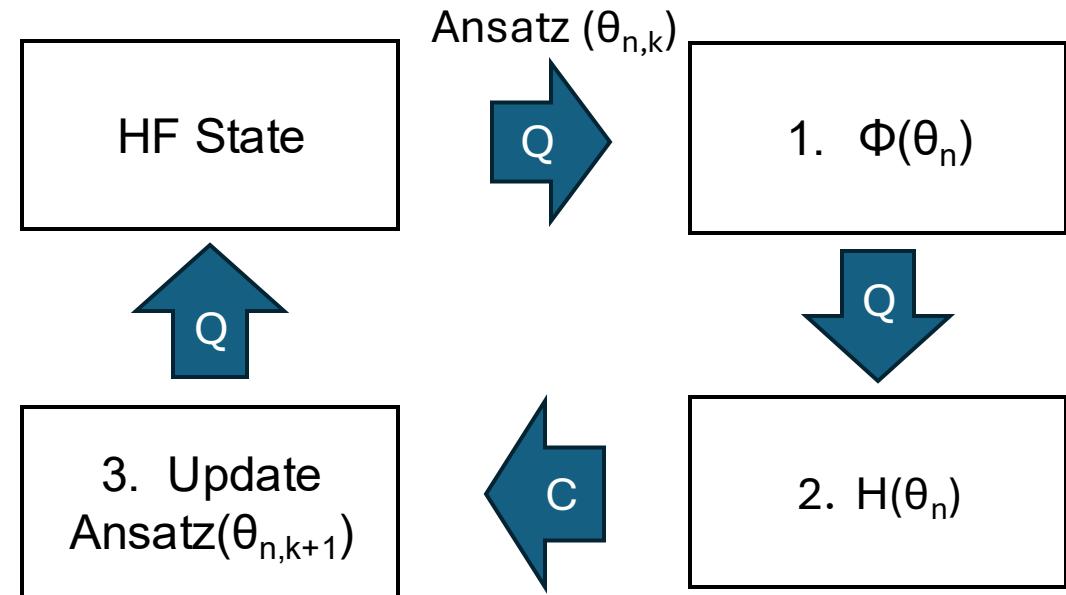
配位数は ${}_6C_3 (= 20)$ 個 → 20×20 次元の固有値問題

変分量子固有値ソルバー(VQE)による基底状態抽出

変分量子固有値ソルバー(VQE)

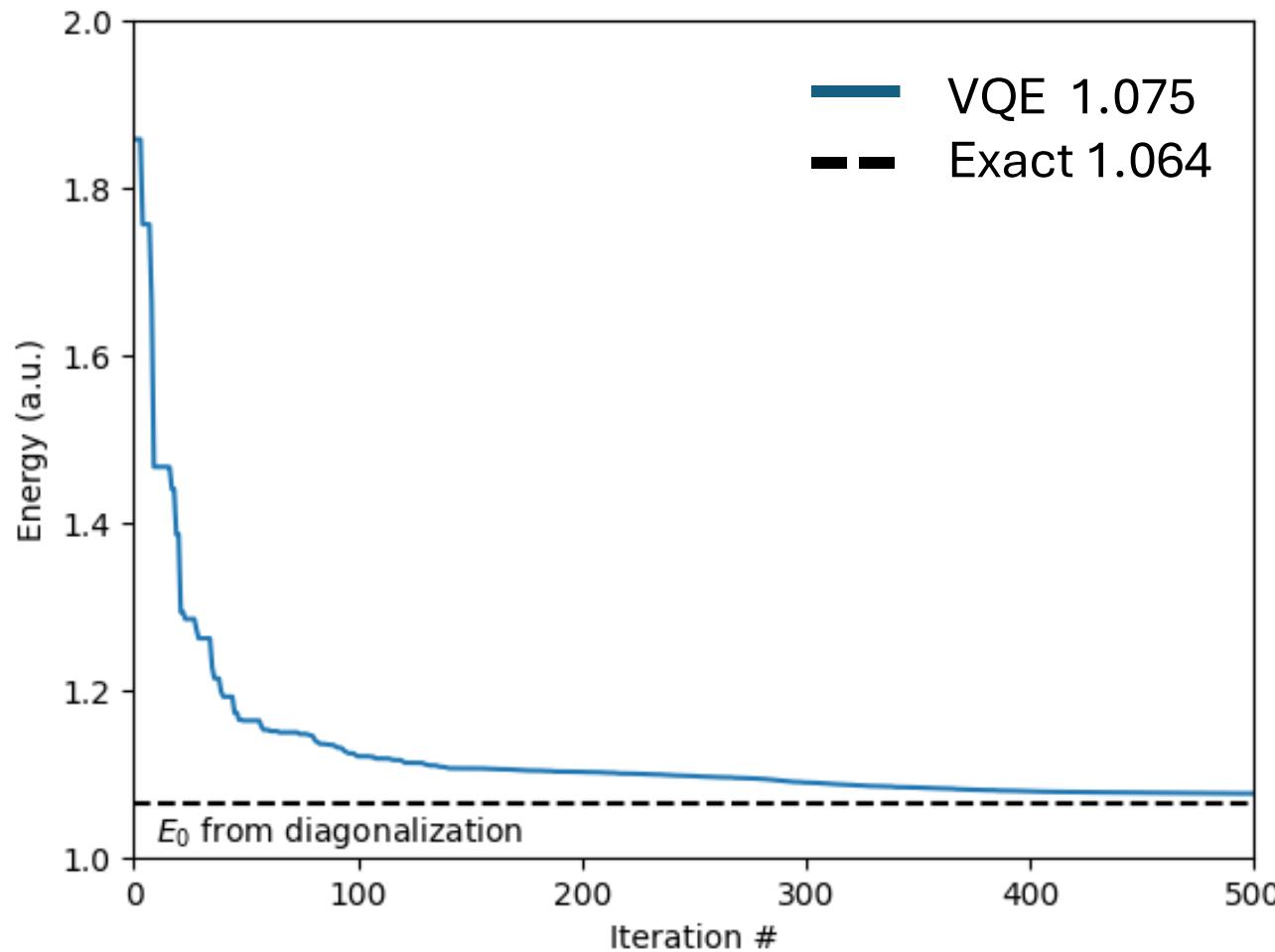
変分法に対して、量子コンピュータで効率的に記述できる量子状態を用いて基底状態を探査するアルゴリズムである。

1. (Q) 任意の状態を生成
2. (Q) Hamiltonianでenergyを計算
3. (C) 量子計算機の計算結果を基にパラメータを更新



Q: 量子計算機による計算
C: 古典計算機による計算

変分量子固有値ソルバー(VQE)による基底状態抽出



COBYLAによる基底エネルギー探索

厳密対角化で得られた基底ベクトルとの内積(Fidelity): **0.9928**
実行時間: 10 min (Pauliの簡略化なし)

量子位相推定(QPE)によるエネルギースペクトル抽出

量子位相推定(QPE)

3体ハミルトニアンHの固有エネルギーを位相情報として抽出する

$$V = e^{-i \underline{H} t}$$

known

$$V |\psi_k\rangle = e^{-i \underline{E}_k t} |\psi_k\rangle$$

output

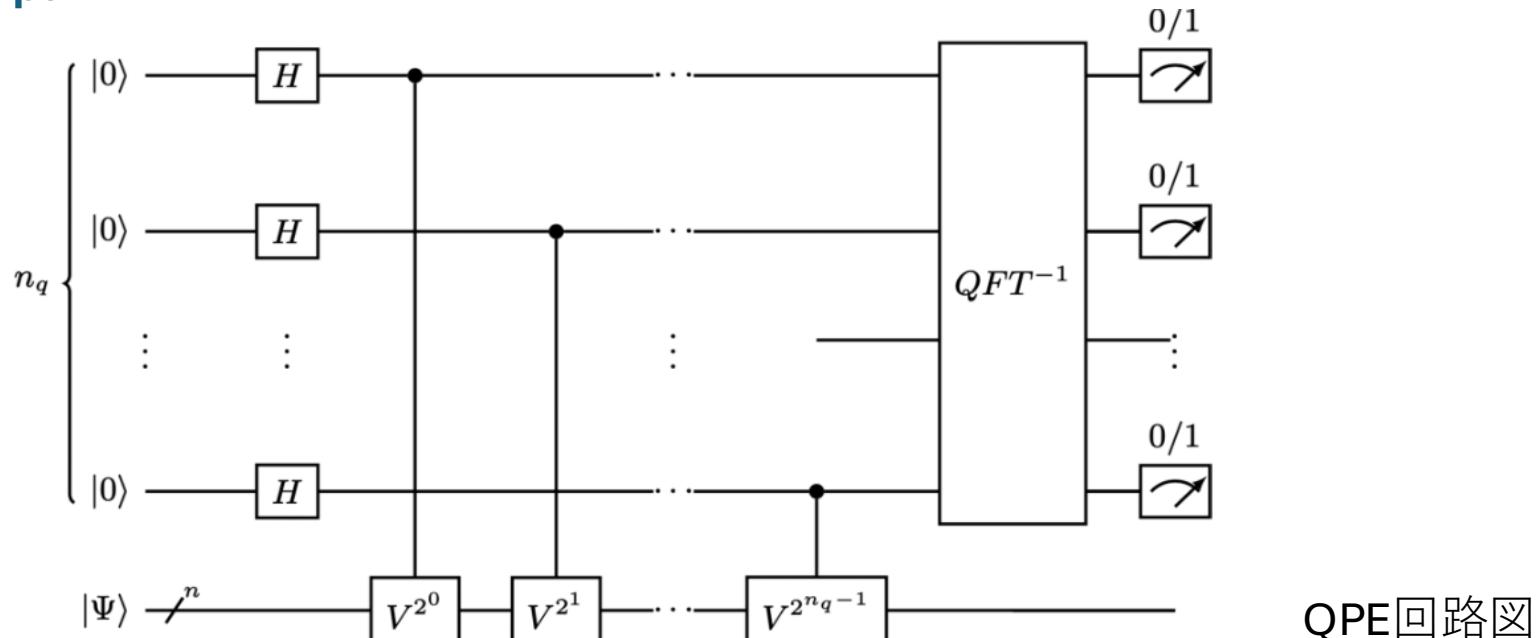
$t \lesssim \frac{2\pi}{\Delta E}$

$\Delta E = E_{\max} - E_{\min}$

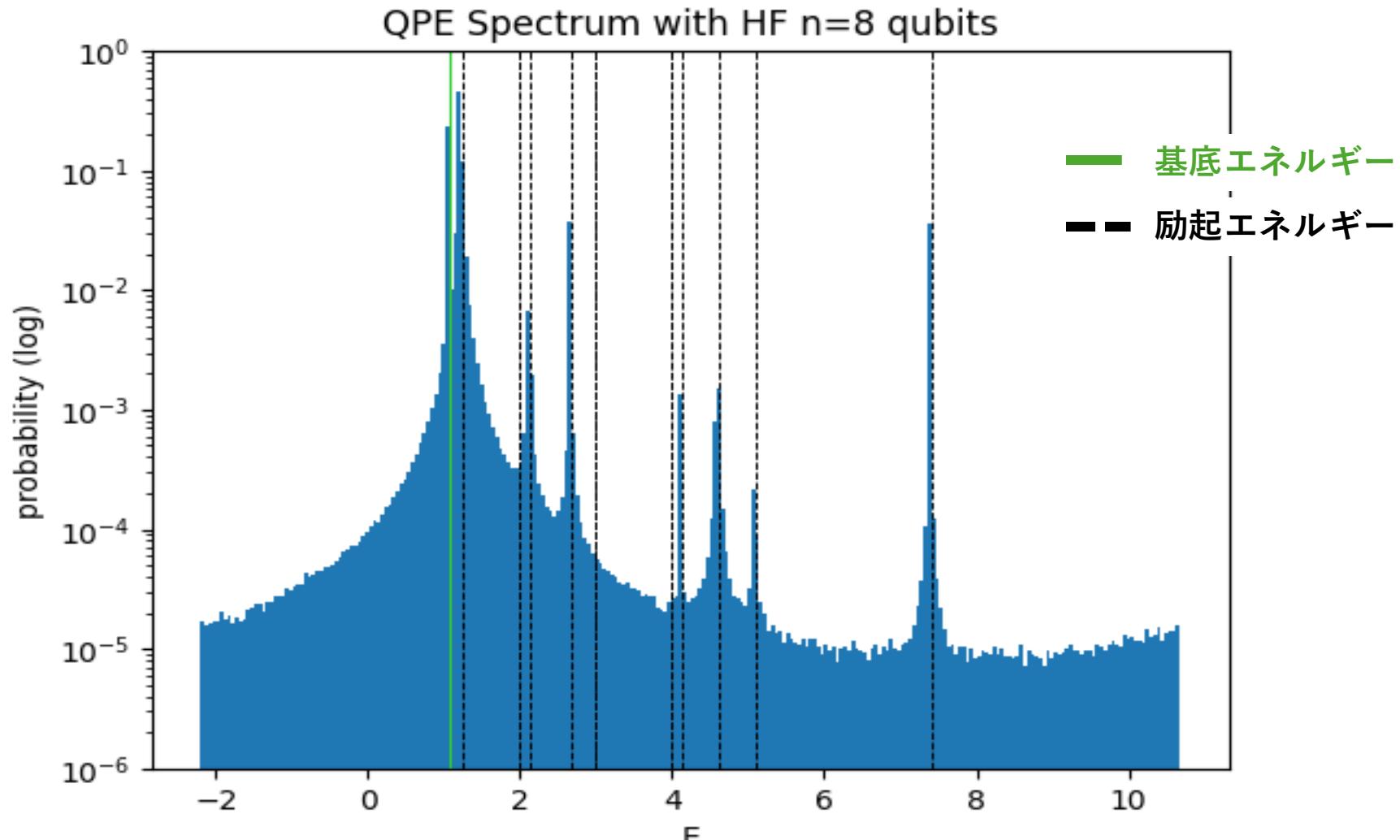
補助量子ビットの測定
指数精度で位相を求める

$$\phi_k = \frac{E_k t}{2\pi}$$

input



FTQCシミュレータにおける測定結果

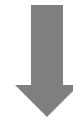


補助量子ビット数8でのシミュレータ上の測定結果

実機実行

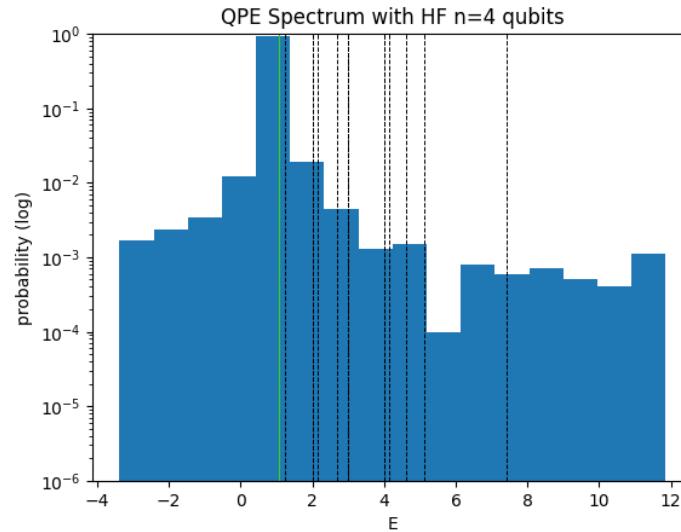
- 8補助量子ビット
- パウリ項数 652

回路深さ : 122493

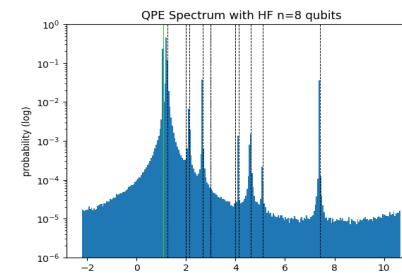


- H をパウリ展開した際の係数が大きい方から**上位10項**のみを採用
- 補助量子ビット数を **8 → 4** へ削減

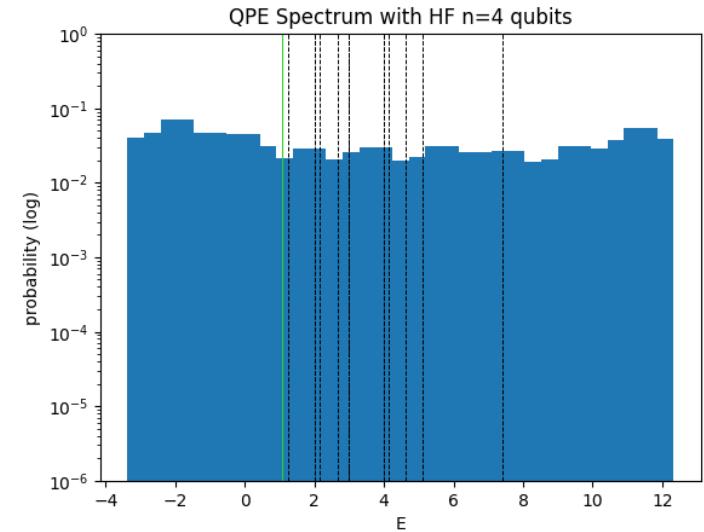
回路深さ : 1157へ削減



FTQCシミュレータ上の測定結果



- 基底エネルギー
- 励起エネルギー



IBM実機(Heron r2)上の測定結果

量子Krylov部分空間法(QKS)

Krylov部分空間法

$$\mathcal{K}^{(n)} = \text{span}\{\lvert\Psi\rangle, H\lvert\Psi\rangle, H^2\lvert\Psi\rangle, \dots, H^{n-1}\lvert\Psi\rangle\}$$

量子Krylov部分空間法(QKS)

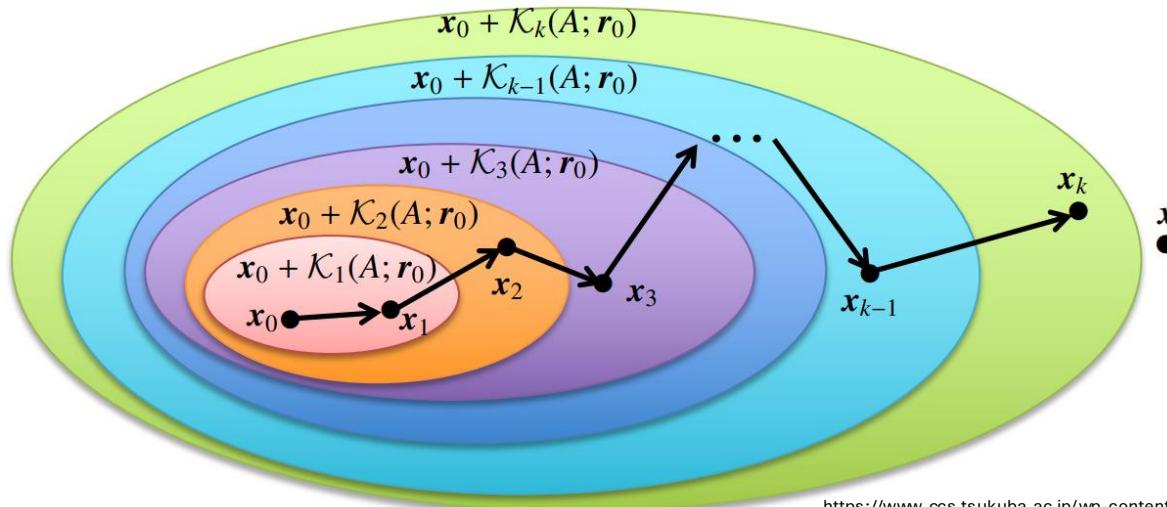
$$\mathcal{K}^{(n)} = \text{span}\{\lvert\Psi_0\rangle, \lvert\Psi_1\rangle, \lvert\Psi_2\rangle, \dots, \lvert\Psi_{n-1}\rangle\} \quad \lvert\Psi_i\rangle = e^{-iH\tau_i} \lvert\Psi_0\rangle$$

部分空間の中で固有値問題を解く

$$\tilde{H} \lvert\Psi\rangle = EN \lvert\Psi\rangle$$

$$N_{kl} = \langle\Psi_k|\Psi_l\rangle$$

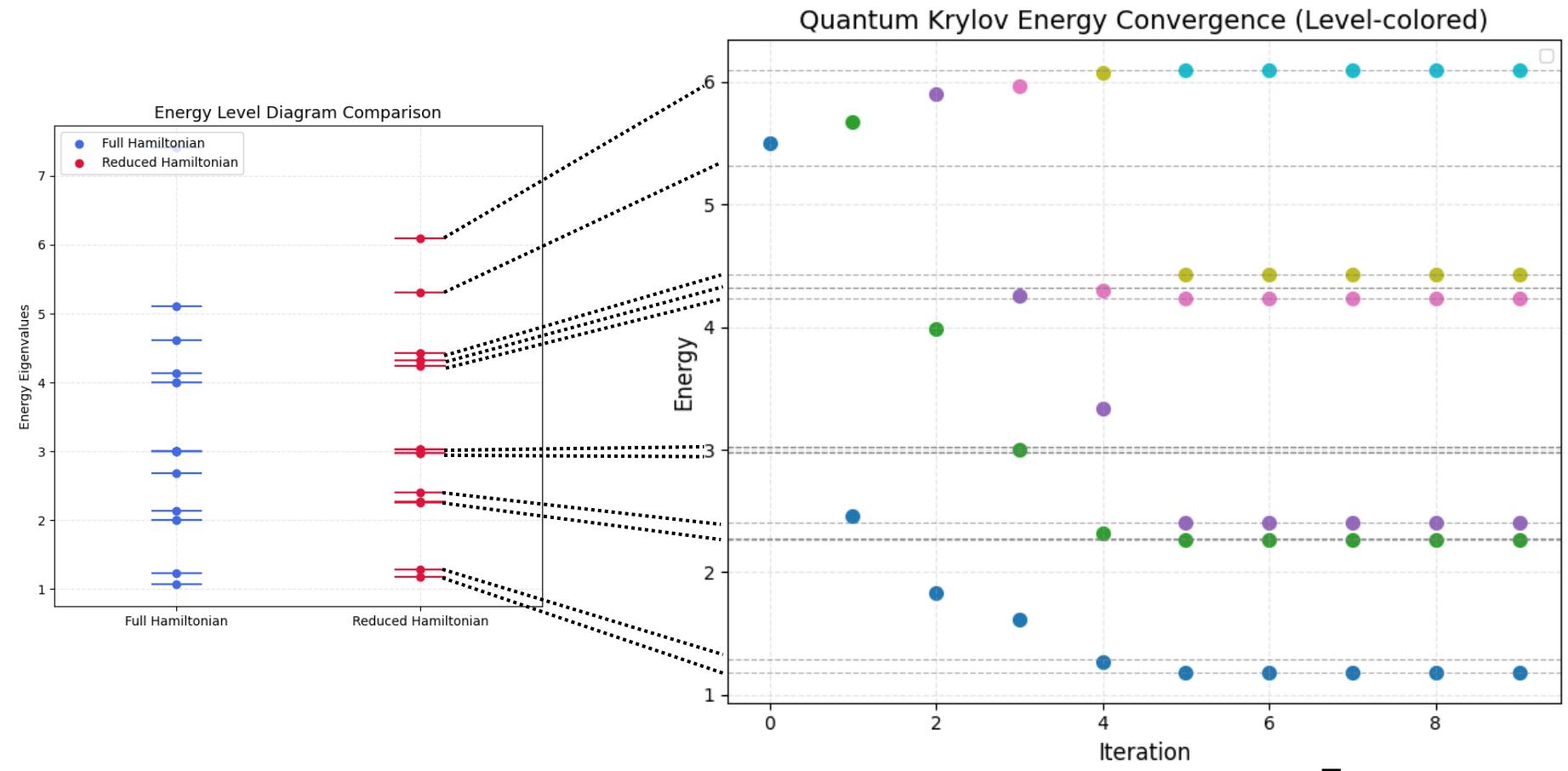
$$\tilde{H}_{kl} = \langle\Psi_k|H|\Psi_l\rangle$$



<https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/wp-content/uploads/sites/14/a14376d9d23b3442686c34cf83b49091.png>

量子Krylov部分空間法(QKS)

ハミルトニアンをPauli Stringの和に変換 652項 → 154項
計算に時間がかかる
微小係数項を取り除く



まとめ

三体力を含んだ原子核ハミルトンで基底エネルギーを
3つの量子計算アルゴリズムで求めることができた

QPEに関しては実機で実行できた
しかし、基底エネルギーにpeakは確認できなかった

	VQE	QPE	QKS
計算時間	~10m (State vector Estimator)	~10s(Aer Sim.) ~10s(real, simplified Pauli)	~100m(State vector Estimator)
励起状態	難	可	容易

展望

- VQE, QKSについて実機で検証する
- より現実に近い系での計算を行う

IBMがFTQCを作れば、現実的な原子核のエネルギー計算も可能になると期待される