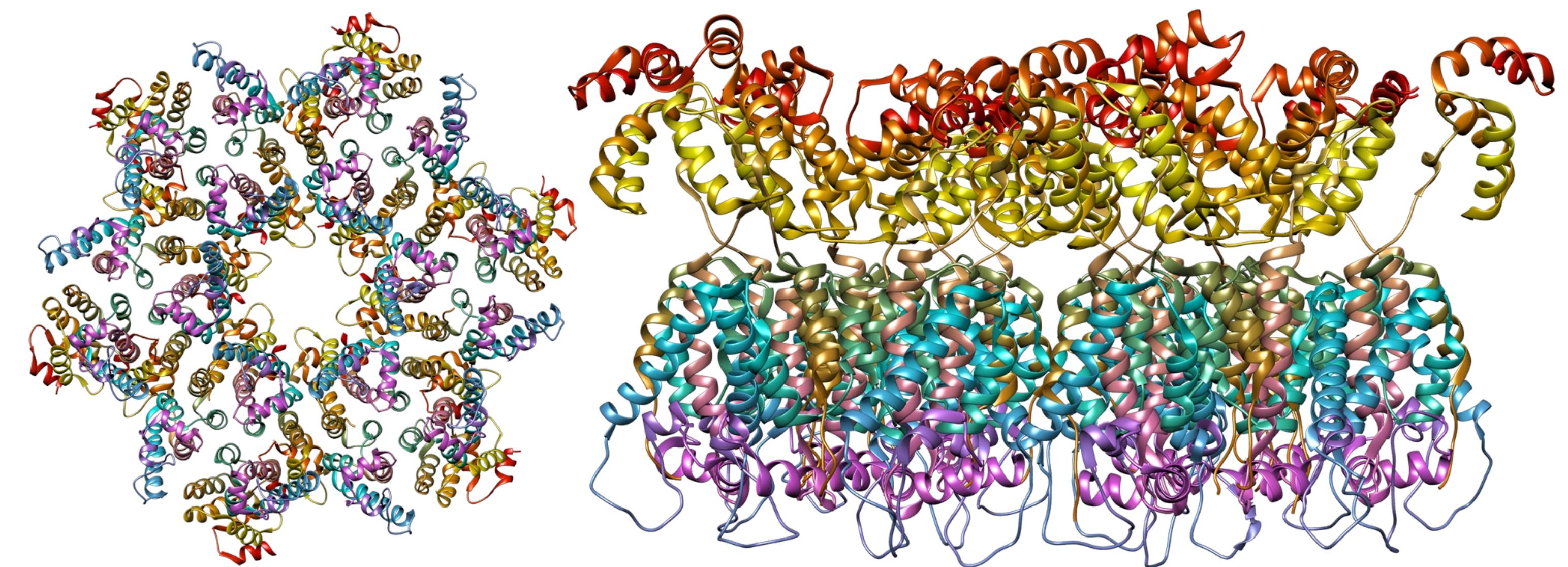


# 分子のシミュレーション

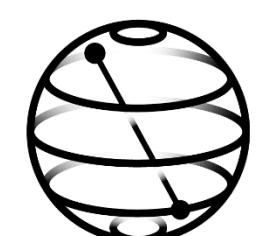
柏原 穂乃実

Honomi Kashihara

IBM Quantum



川崎市  
KAWASAKI CITY



Qiskit

# シミュレーションで予測できるのは...?

シミュレーションとは...

法則を表す方程式(モデル)を解き、再現や予測すること。

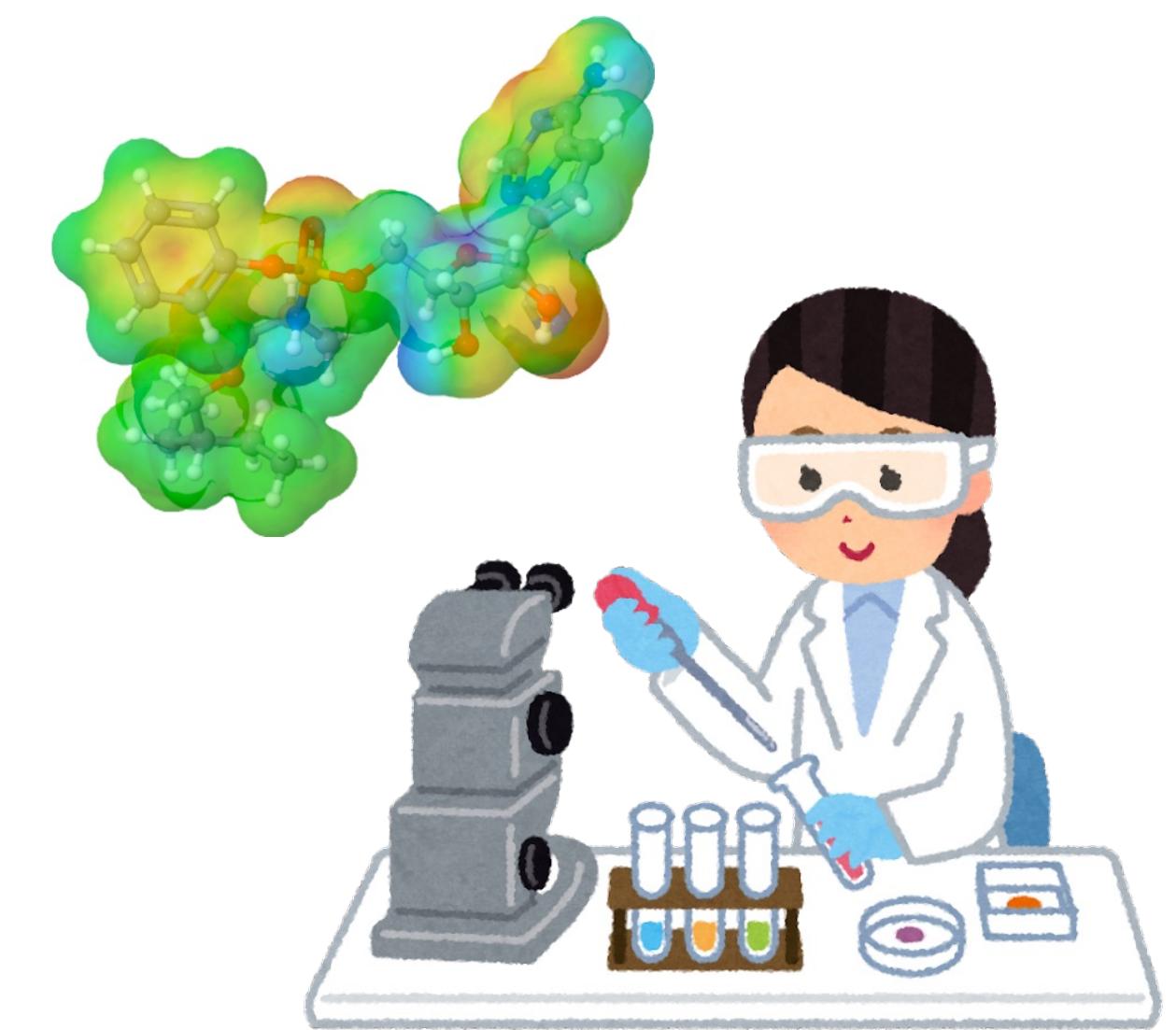
①バスケットボールの軌跡



②スペースシャトルの耐久性



③新薬のための化学実験



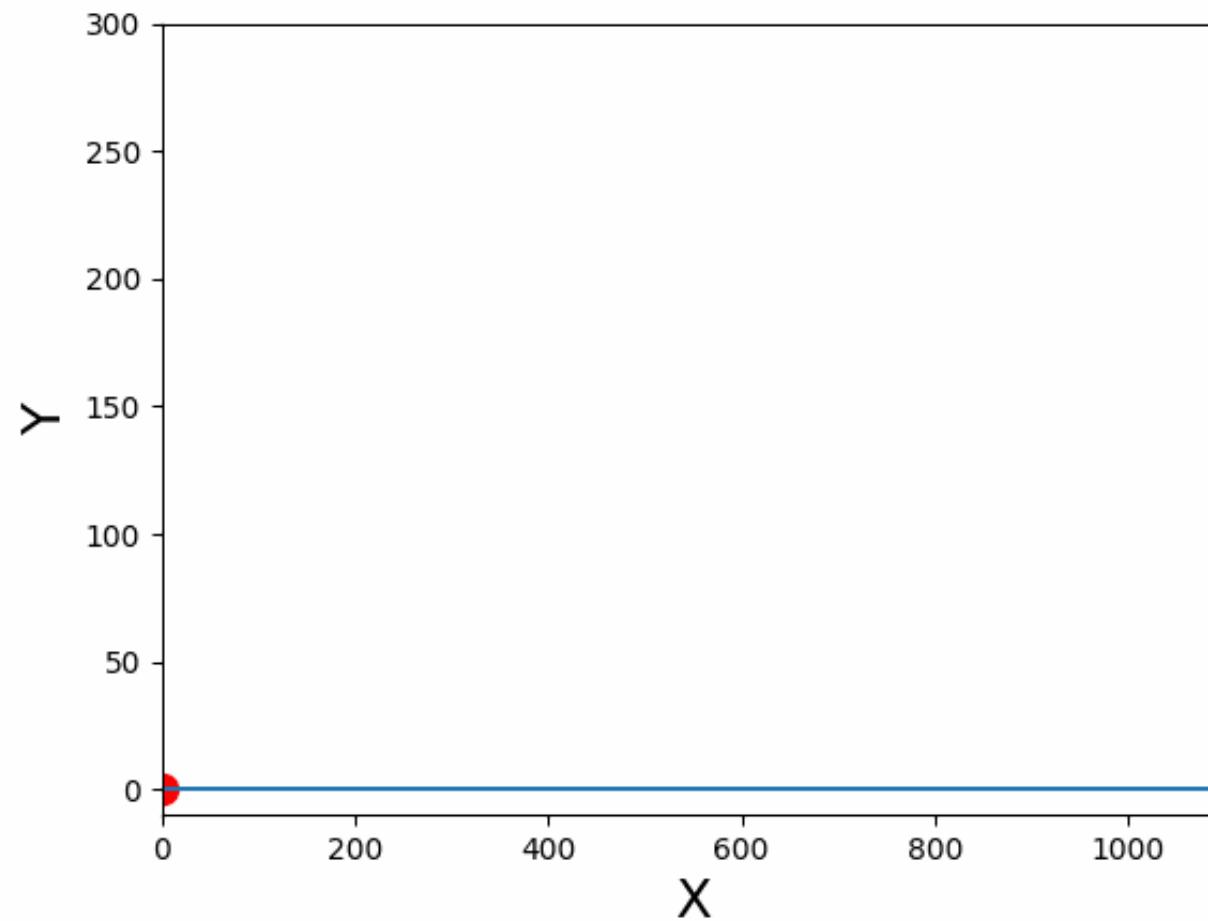
# シミュレーションで予測できるのは...?

シミュレーションとは...

法則を表す方程式(モデル)を解き、再現や予測すること。

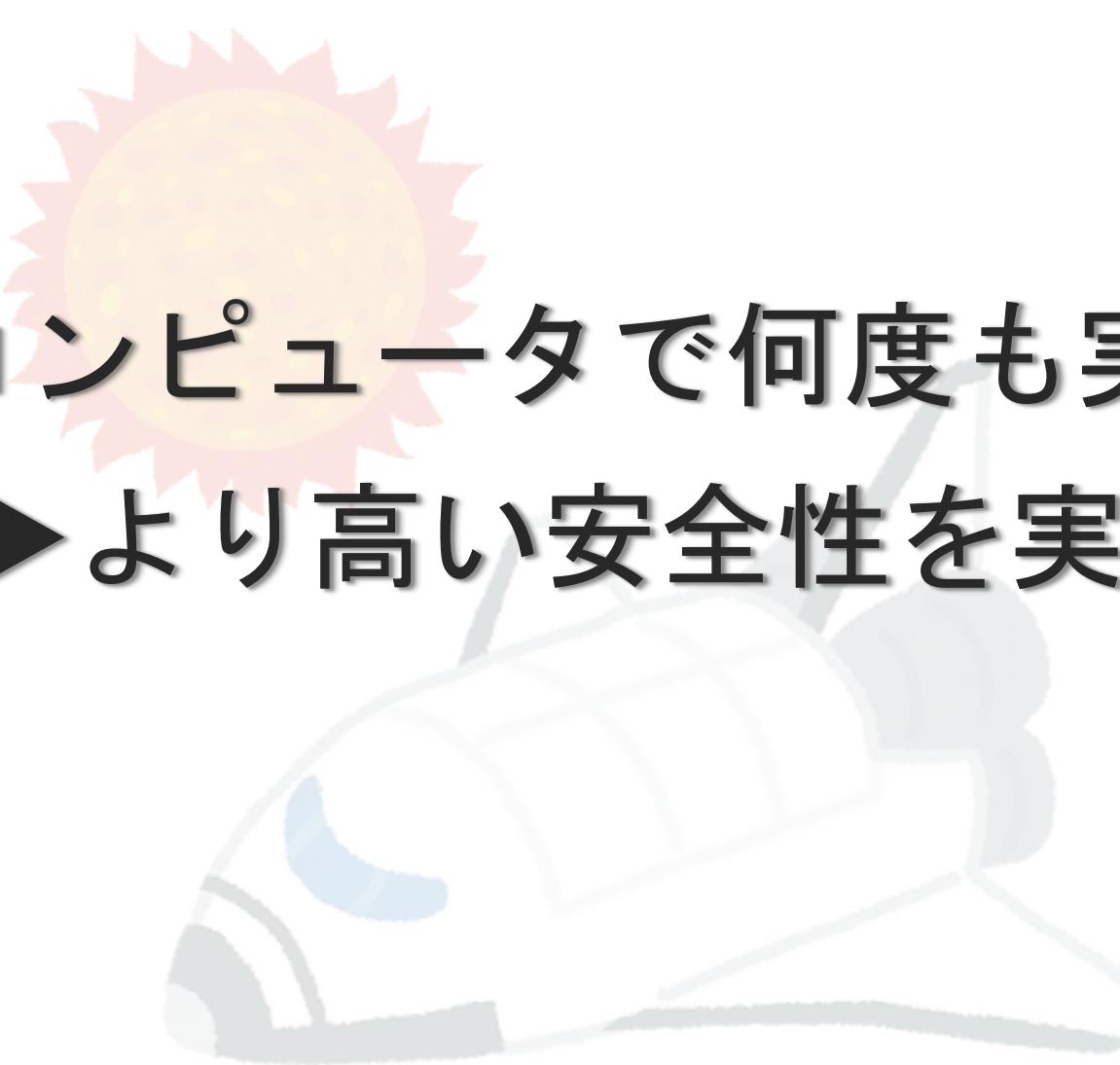
①バスケットボールの軌跡

運動方程式  $ma = F$  も  
運動を表すモデル



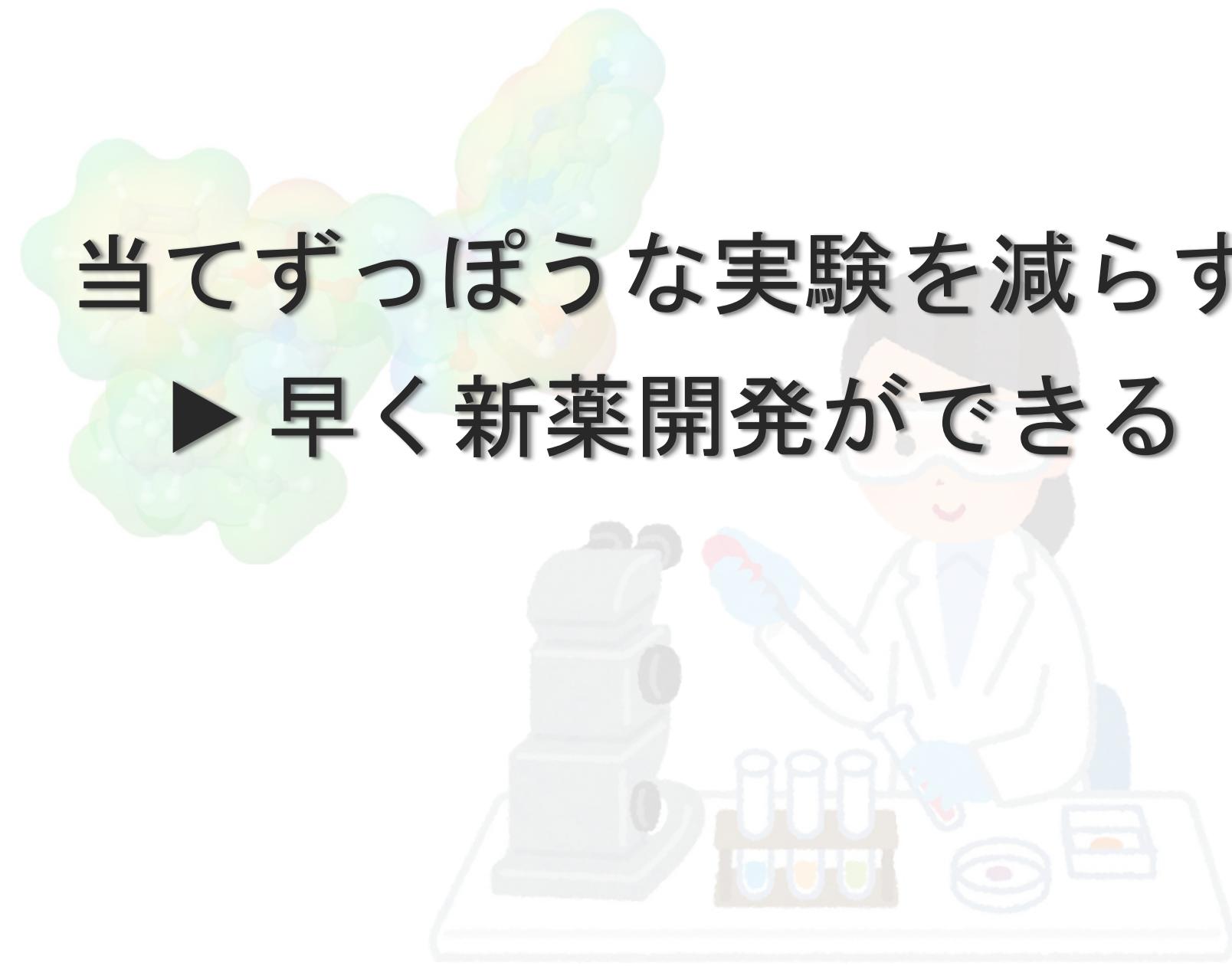
②スペースシャトルの耐久性

コンピュータで何度も実験  
▶より高い安全性を実現



③新薬のための化学実験

当てずっぽうな実験を減らす  
▶早く新薬開発ができる

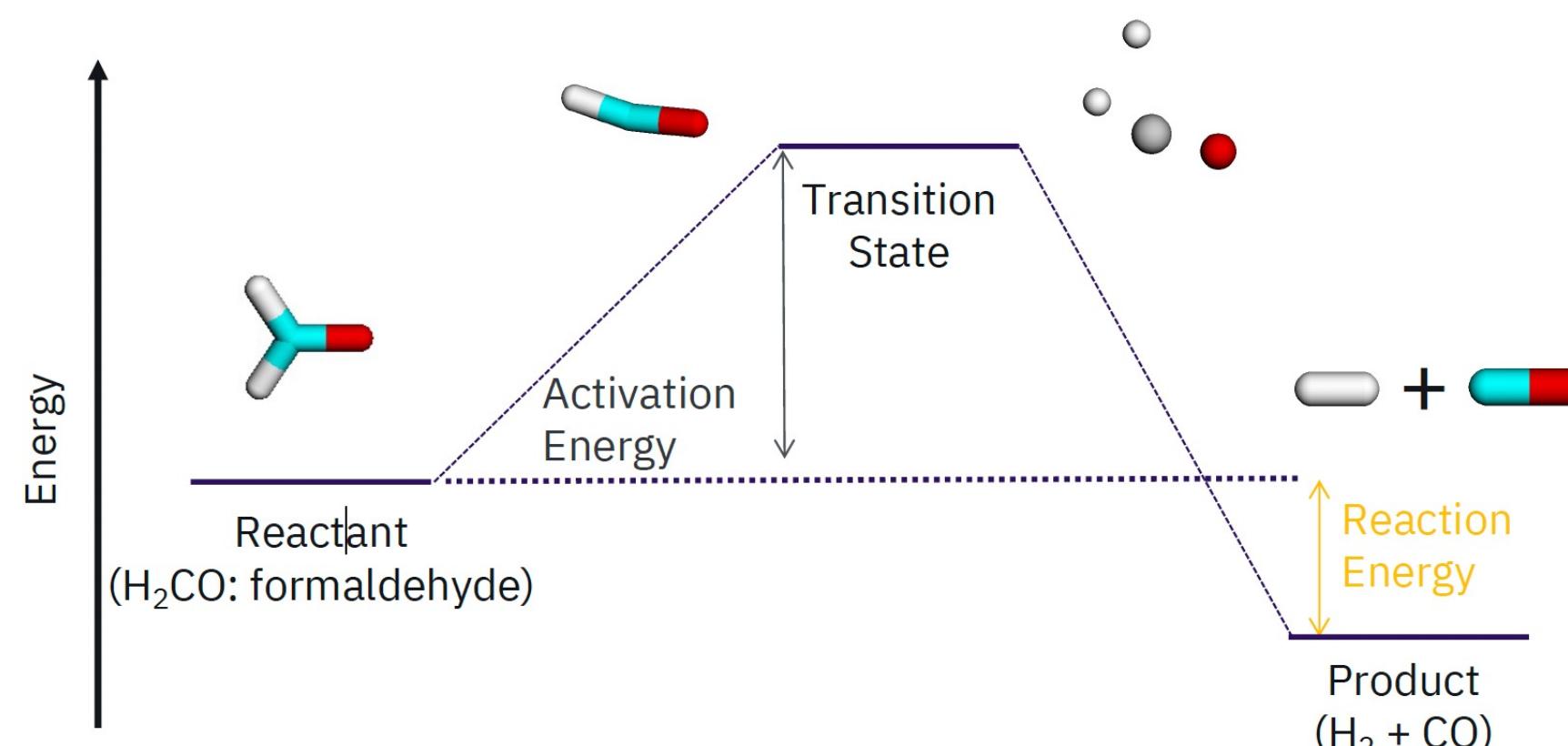


# 分子シミュレーションで何ができるの？

→ 物質の反応を予測したり、性質を調査できる

例えば、分子や原子のエネルギーがわかると…

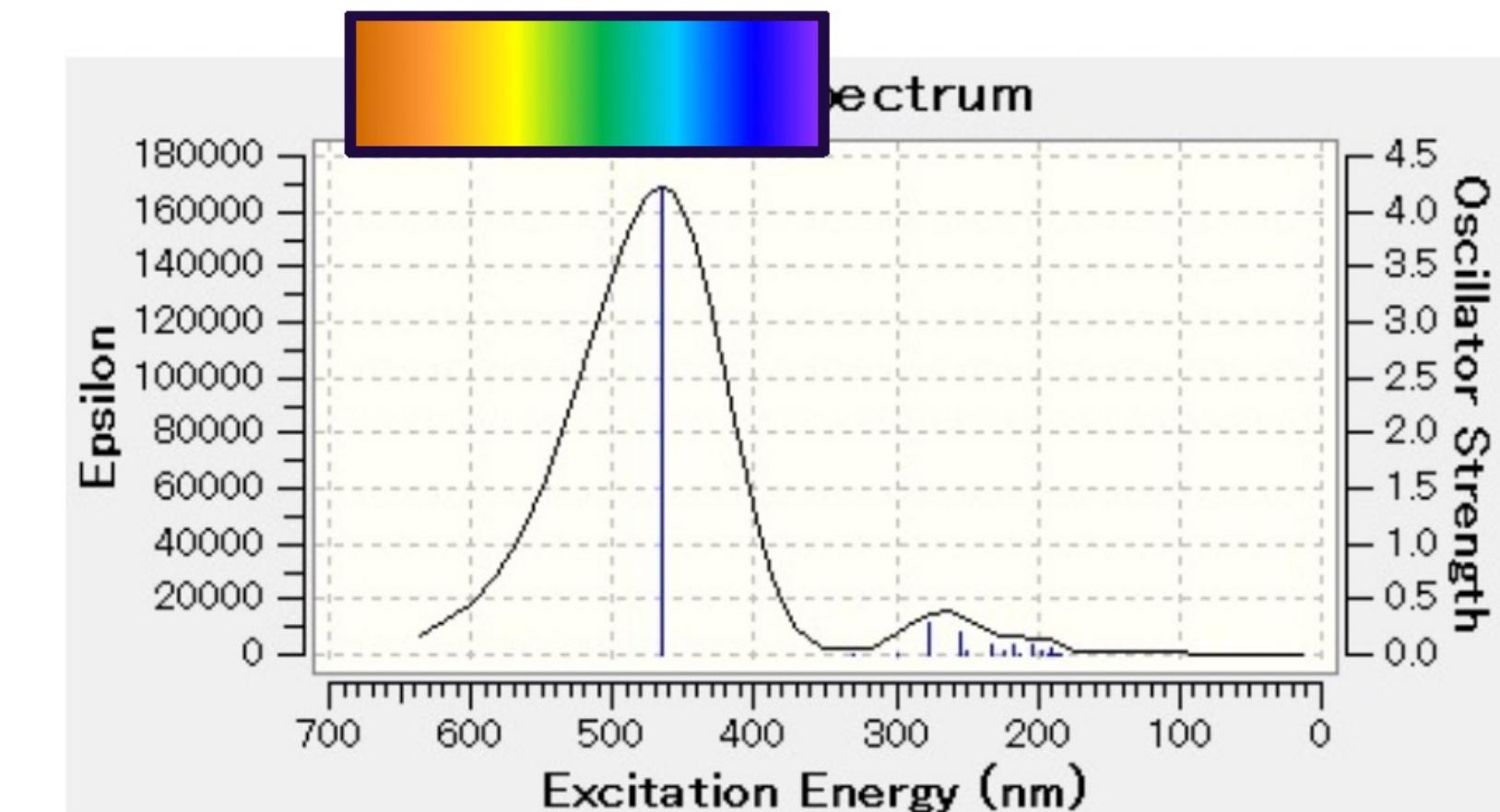
化学反応が予測できる！



QGSS2022 川島雪生さんの資料より

活性化工エネルギーと反応エネルギーを計算  
→ 観察できない反応の過程を予測できる。

物質の色が予測できる！

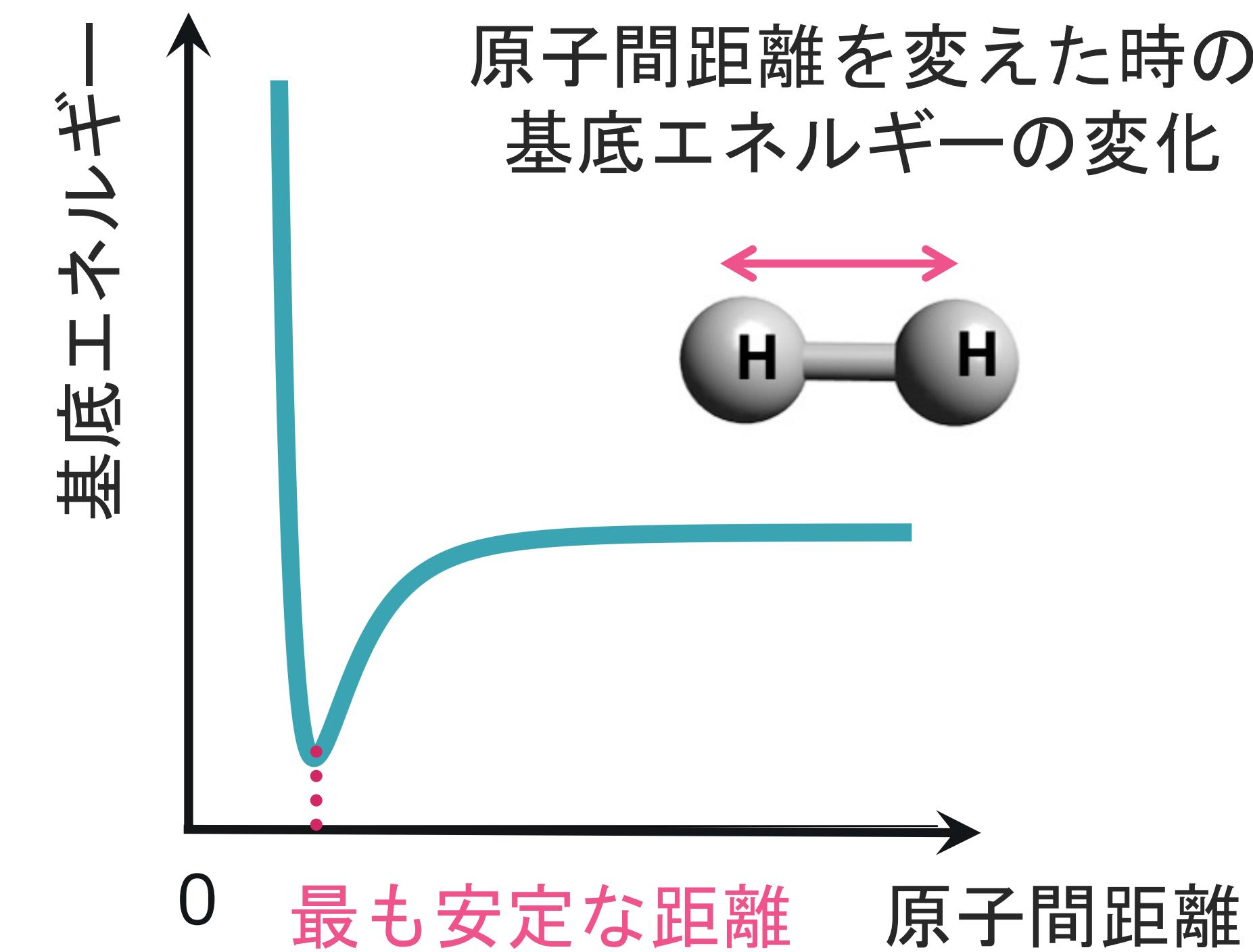
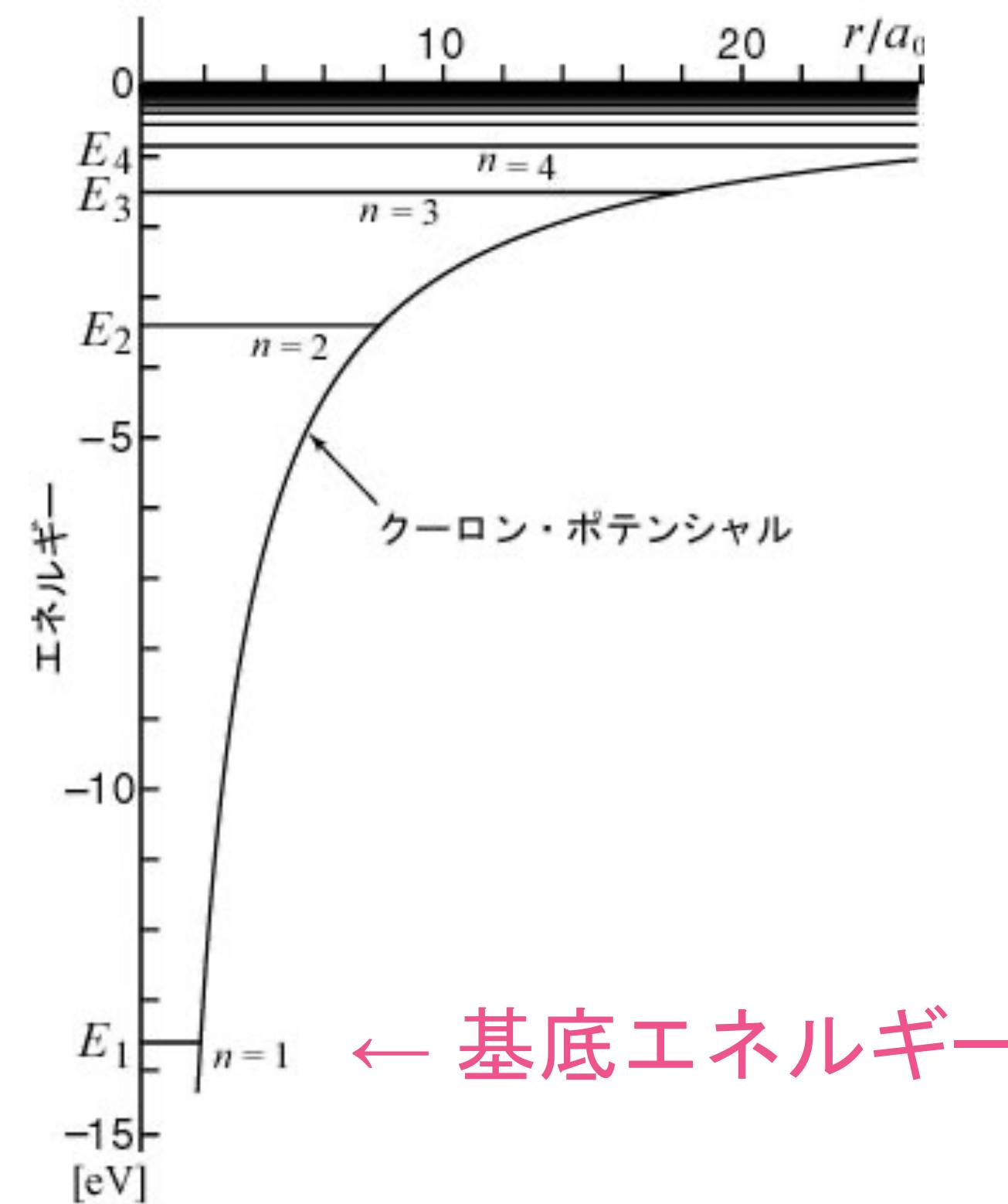


エネルギーごとに吸収する色が違う  
→ 反射する色(=目に見える色)が予測できる。

# 今日取り組むこと

- 1) 水素分子の基底エネルギーを求める
- 2) 基底エネルギーを計算し、HIV の薬の効果を調べる

→ 原子、分子のエネルギーが最も低く、安定するときの値 (原子間距離で変化)



基底エネルギーを求めるには...?

→ シュレディンガーアルゴリズム (原子や分子を表す式) を解く!

シュレディンガーアルゴリズム :  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

- ✓ 波動関数  $|\psi\rangle$  : 粒子の位置情報が保存されている関数/ベクトル
- ✓ ハミルトニアン  $\hat{H}$  : 波動関数の様々な情報から、エネルギーを取り出す演算子
- ✓ エネルギー固有値  $E$  : 波動関数  $|\psi\rangle$  にハミルトニアンを作用し得られる値

波動関数  $|\psi\rangle$  にハミルトニアン  $\hat{H}$  を作用させると、エネルギーを計算できる

# 分子シミュレーションは超万能...?

→ 今のコンピュータではできないことも多い

シュレディンガ一方程式  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  を解くのは大変

例) カフェインのシミュレーション

方程式を覚えておく十分な場所がない = ビットが足りない

古典コンピュータ

0	0	0	0
---	---	---	---

0	0	0	1
---	---	---	---

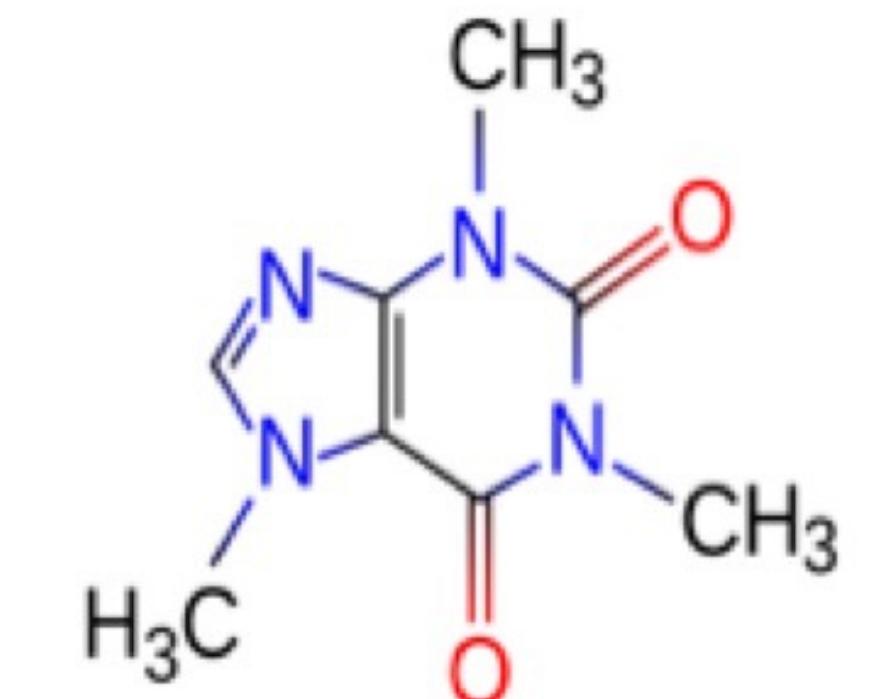
:



量子コンピュータ

$ 0\rangle$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$
-------------	-------------	-------------	-------------

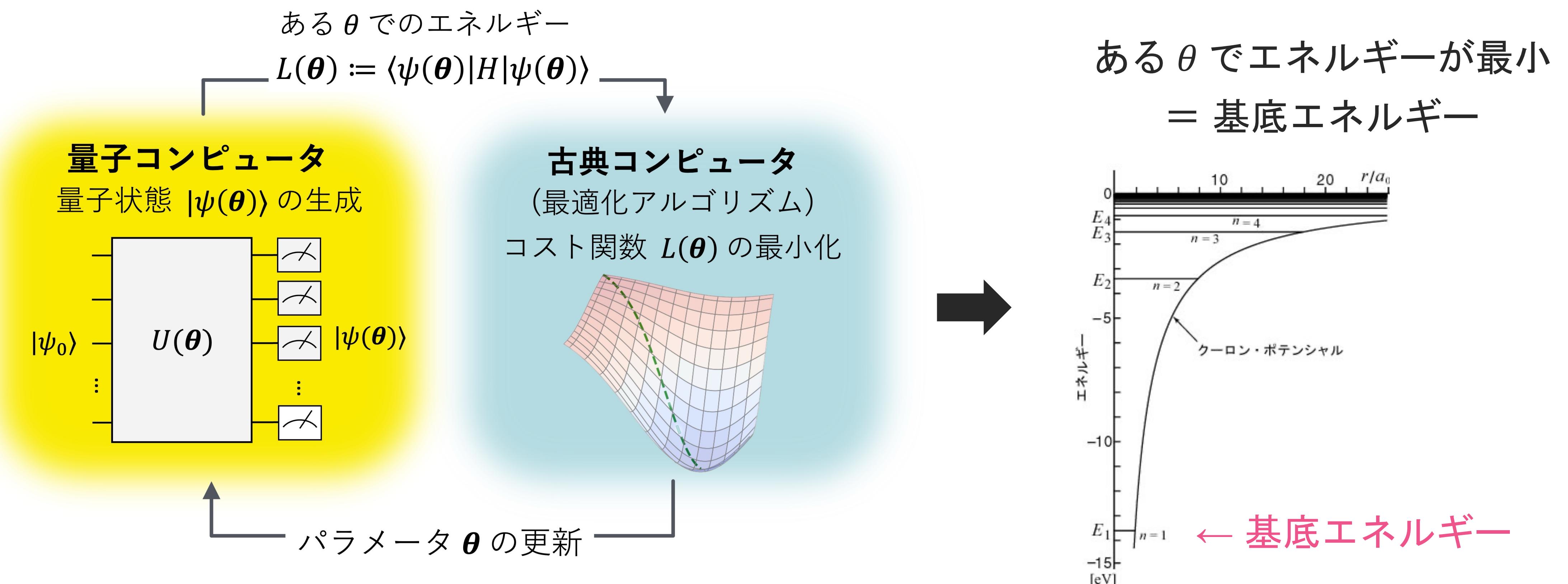
量子ビットの重ね合わせの性質を利用  
→ 少ない量子ビットで表現



# 量子コンピュータで基底エネルギーを求めるには...?

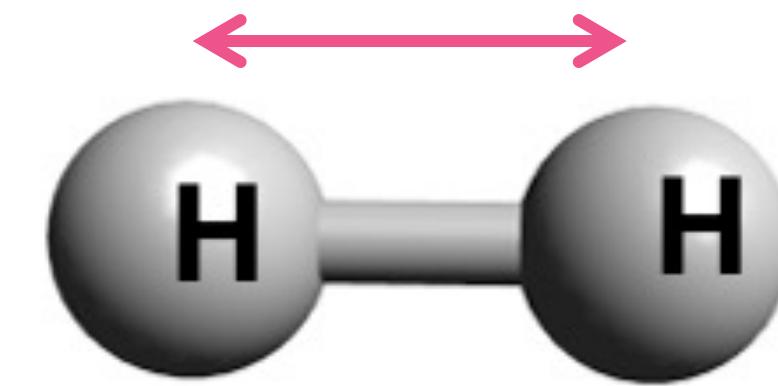
→ 変分量子固有値ソルバー (Variational Quantum Eigensolver, VQE)

量子コンピュータの得意な計算と古典コンピュータでの計算を組み合わせた、NISQでのエラーの影響を抑えるためのハイブリッド手法。



# ① 水素分子の基底エネルギーを求めるStep

コードの Step1~6 と対応しています！



- ① 水素分子の構造（原子種と位置座標）を定義し、必要な情報を得る。
- ② 電子のエネルギー式を作成。→ハミルトニアン
- ③ エネルギー式を量子ゲートに変換。
- ④ トライアル状態  $|\psi(\theta)\rangle$ （パラメーター付き量子状態）を指定。
- ⑤ VQE（=基底状態を求めるプログラム）を実行。
- ⑥ 原子間距離を変えてそれぞれでVQEを実行し、基底エネルギーの変化を調べる。

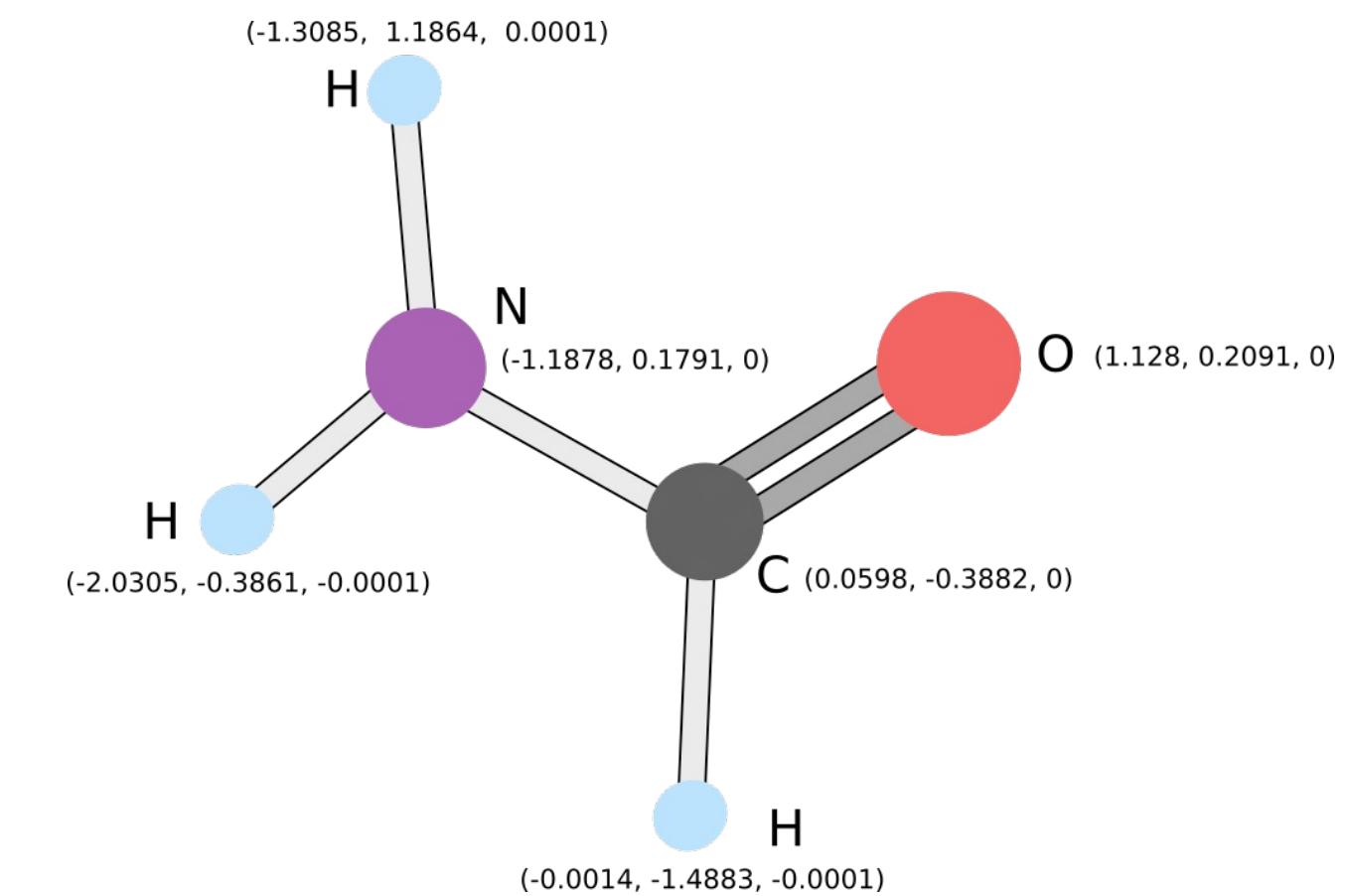
## ② HIVの新しい治療薬を調べるためにシミュレーション

薬がHIVに効果があるかを調べる (Quantum Challenge Africa Lab3から)

- ✓ HIV (ヒト免疫不全ウイルス) :

ウイルスの一種。増えるために必要なタンパク質を、細胞のタンパク質を切断することで手に入れる。

プロテアーゼのトイモデル



- ✓ プロアテーゼ :

HIVが持つ酵素。タンパク質を切断するハサミ。

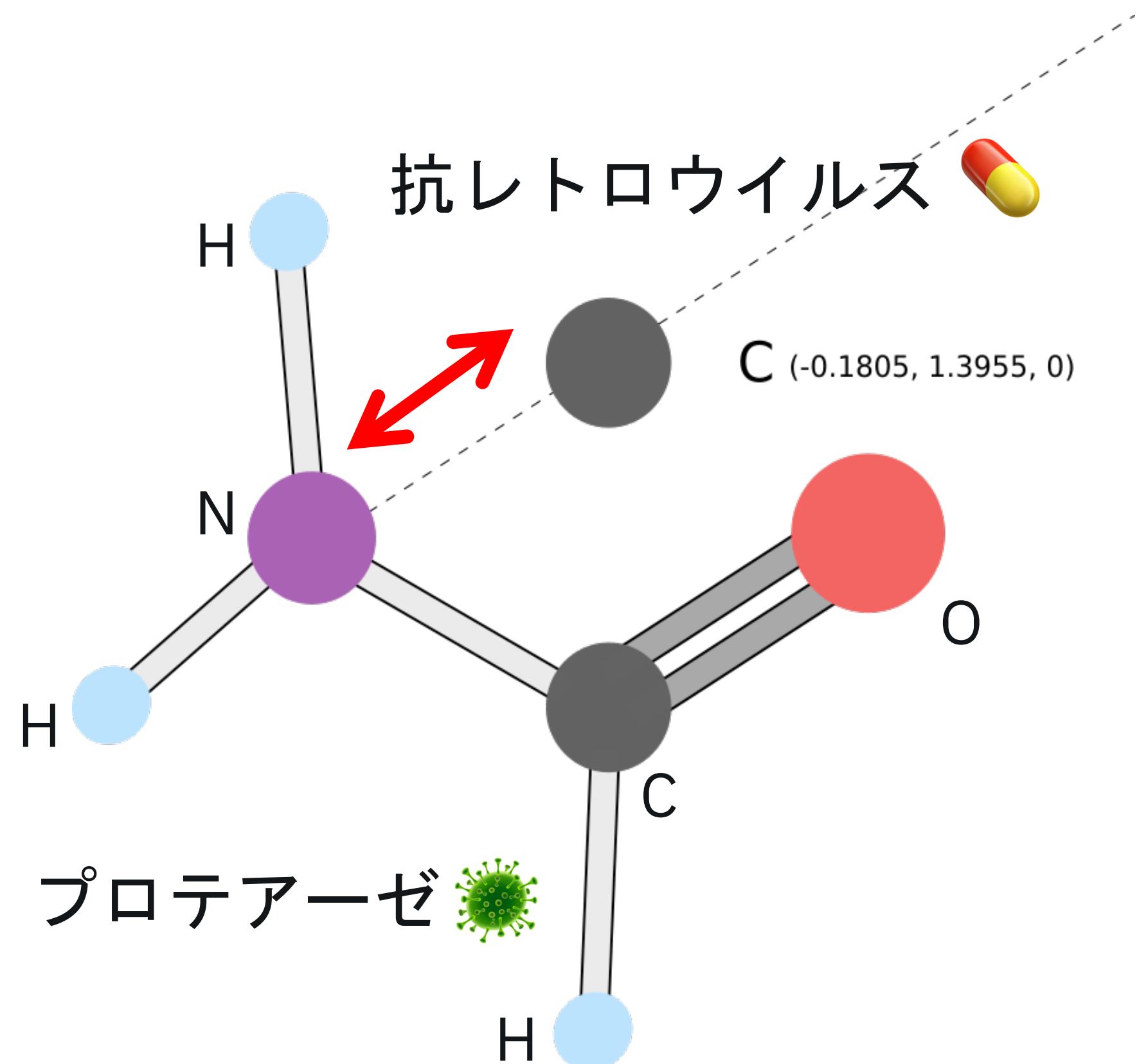
- ✓ 抗レトロウイルス剤 (薬) :

プロアテーゼにくっつくことで、プロアテーゼがタンパク質を切断できないようにする  
→HIVが体の中で増殖するのを止める！

抗レトロウイルス(薬)のトイモデル



# 抗レトロウイルス剤 がプロテアーゼ と結合するか調べる



薬はHIVに対して機能する？

→ 薬がプロアテーゼのハサミを壊せる？

→ 薬はプロアテーゼと結合する？

→ C 原子(薬)は N 原子(プロアテーゼ)と結合する？

→ 基底エネルギーは小さくなる？