2021 年度優秀学生表彰受賞者の研究紹介

東北大学
工学部 電気情報物理工学科
小田川　朋史

【研究紹介】

この度はこのような栄誉ある賞に選出していただき，大変光栄に思います．また，日頃よりご指導いただいている皆様方にこの場をお借りして心より深く感謝申し上げます．

私は現在，量子コンピュータの一種であるガウシアンボゾンサンプリングを用いた量子化学計算の研究を行っています．近年，新たな材料の開発・設計の際には量子力学に基づく解析手法である量子化学計算により，その材料の性質や機能性，反応メカニズムを事前に予測することが行われています．これにより実際に材料を合成する過程の合理化やその過程で生じ得る課題に対する解決策へと繋がるため，今後，更に量子化学計算の重要性が増すと予測されます．一方，量子力学に基づく計算は所謂パソコンと呼ばれる古典コンピュータでは最適なアルゴリズムが存在せず，計算量が膨大となるため，複雑な構造を持つ材料ほど計算が困難になります．ガウシアンボゾンサンプリングではそのような計算に対する最適なアルゴリズムが理論上見つかっていますが，そのアルゴリズムに最適化された量子コンピュータが作られておらず，実機上での計算は行われていません．そのため，量子化学計算に最適化された量子コンピュータの開発を目指しています．

博士前期課程でも，量子コンピュータによる量子化学計算の実現のためにこの度いただいた賞に恥じぬよう，より一層の努力を重ねて研究に励んで参ります．今後ともご指導・ご鞭撻のほどをお願い致します．