

最適化とAIの融合技術による 材料探索の研究事例

コウチ

Mitsubishi Chemical Corporation
Science & Innovation Center

2024/05/09

DXの推進

デジタルイゼーション

サプライチェーンにおける主要DXテーマ



主要DXテーマ



- MCHC Connectの導入
 - 営業、トレーニング、イントラ、啓発等のワン・ストップポータル



- グローバル・ビジネス・プロセス・カウンセルの導入



- 社内における各領域の専門性の共有
- 文書化されていない80%のナレッジの有効活用

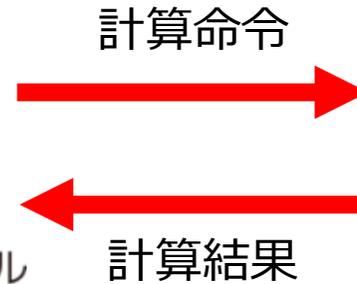
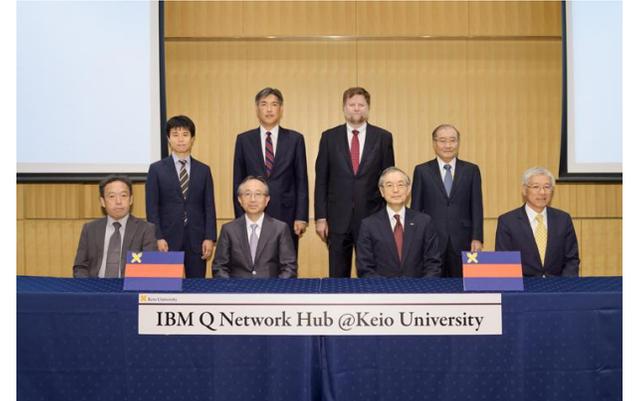


- 新組織体制における評価・報酬システム

デジタル戦略の強化によって、CXとビジネスプロセスのトランスフォーメーションを実現

IBM Q_Hub @ 慶應大学

- ✓ 2018年に慶應大学の伊藤先生より開設された米ニューヨークに設置された商用量子コンピュータIBM Qにクラウドを通じてアクセス可能な拠点の一つ。
- ✓ 国内のNetwork Hubの参加企業、海外のHub参加企業、IBM研究者との協業による分野を超えた人的ネットワークの構築。
- ✓ 実用的な量子アプリケーションの開発を目指す:新材料探索、機械学習(AI)、実時間金融計算、創薬…等。



米ニューヨーク州
IBM Qシステム

慶應Q HubにおけるMCCの活動概要

共同研究機関



JSR Corporation.

研究プロジェクト

量子化学

- 1) 化学反応：
リチウム空気電池
- 2) 励起エネルギー：
有機EL
- 3) テンソル+モンテカルロの量子アルゴリズムの開発

最適化

- 1) 同位体有機EL発光材料の探索
- 2) フォトクロミック材料の探索

AI

- 1) 分類問題：
2分類手法開発
- 2) リザーバー学習：
脳の模倣

THE JOURNAL OF
PHYSICAL
CHEMISTRY
A
A JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

pubsacs.org/JPCA

Article

Computational Investigations of the Lithium Superoxide Dimer Rearrangement on Noisy Quantum Devices

Qi Gao,* Hajime Nakamura, Tanvi P. Gujarati, Gavin O. Jones, Julia E. Rice, Stephen P. Wood, Marco Pistoia, Jeannette M. Garcia,* and Naoki Yamamoto*

nature
npj Computational Materials

Applications of Quantum Computing for Investigations of Electronic Transitions in Phenylsulfonyl-carbazole TADF Emitters

Qi Gao^{1,2,*}, Gavin O. Jones^{3,+}, Mario Motta³, Michihiko Sugawara², Hiroshi C. Watanabe², Takao Kobayashi¹, Eriko Watanabe^{1,2}, Yu-ya Ohnishi^{2,4}, Hajime Nakamura^{2,5}, and Naoki Yamamoto^{2,6}

Quantum Machine Intelligence (2020) 2: 9
<https://doi.org/10.1007/s42484-020-00020-y>

RESEARCH ARTICLE



Check for updates

Analysis and synthesis of feature map for kernel-based quantum classifier

Yudai Suzuki¹ · Hiroshi Yano² · Qi Gao^{3,5} · Shumpei Uno^{3,6} · Tomoki Tanaka^{3,7} · Manato Akiyama⁴ · Naoki Yamamoto^{3,8}

Received: 25 October 2019 / Accepted: 21 May 2020 / Published online: 28 July 2020
© Springer Nature Switzerland AG 2020

www.nature.com/scientificreports

scientific reports

OPEN Natural quantum reservoir computing for temporal information processing

Yudai Suzuki^{1,5}, Qi Gao^{3,5}, Ken C. Prada⁷, Kenji Yasuoka¹ & Naoki Yamamoto^{3,8}

QunaSysとの共同研究

スタートアップ (Qunasys) と 特定分野の技術開発を加速

✓ ターゲット：有機光学材料
(有機EL、有機太陽電池など)

✓ 内容：

1. 従来のコンピュータで解けない高精度の光学物性の計算手法の開発
2. NISQに実用できるアプリケーションの開発

媒体名	化学工業日報
掲載日	2019. 9. 26

86
VBと量子計算機活用研究
有機光学材料にMI
三菱ケミカル

量子コンピュータとNISQを想定し、量子化学計算手法の実証研究を行う。従来手法では困難な有機発光材料の発光特性や有機太陽電池の吸光特性、光安定性の高い分子の設計など、リアリス・インフォマティクス(MI)への適用を目指す。共同研究では、Qunasysが開発したアルゴリズムの励起状態計算手法や分子のエネルギー微分計算手法を基に、光吸収ペクトルなど材料設計に必須となる物理量の計算を実証する。同社のシミュレーション用ソフトウェアや量子化学計算ライブラリ、クラウド公開されている小規模な量子コンピュータも利用する。従来の古典コンピュータと計算結果の比較も行う。

量子化学は量子力学による電子や原子の解析を化学に適用する技術・学術領域。NISQは既存コンピュータでは困難な規模の波動関数計算が可能になると期待され、とくに光化学の反応解析への適用は有望視されている。光化学反応は有機ELや蓄光材料の設計に必須といわれている。

- ✓ 振動子強度の物性予測の手法開発：QunaSys、IBM、大阪大学、三菱ケミカルの共同研究。
- ✓ 励起状態反応の計算手法開発：QunaSys、ETH Zurich、大阪大学、三菱ケミカルの共同研究。

PHYSICAL REVIEW RESEARCH 4, 013173 (2022)

Calculating transition amplitudes by variational quantum deflation

Yohei Ibe^{1,*}, Yuya O. Nakagawa¹, Nathan Earnest,² Takahiro Yamamoto,¹ Kosuke Mitarai,^{3,1} Qi Gao,⁴ and Takao Kobayashi⁴

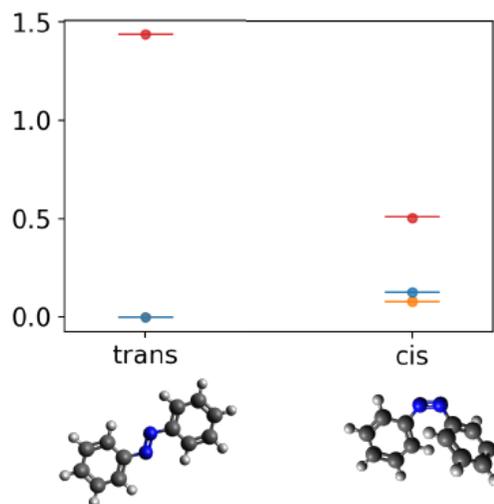
¹QunaSys Inc., Aqua Hakusan Building 9F, 1-13-7 Hakusan, Bunkyo, Tokyo 113-0001, Japan
²IBM Quantum, IBM T. J. Watson Research Center, Yorktown Heights, New York 10598, USA
³Graduate School of Engineering Science, Osaka University, 1-3 Machikaneyama, Toyonaka, Osaka 560-8531, Japan
⁴Mitsubishi Chemical Corporation, Science & Innovation Center, 1000, Kamoshida-cho, Aoba-ku, Yokohama 227-8502, Japan

JCTC
Journal of Chemical Theory and Computation

pubs.acs.org/JCTC Article

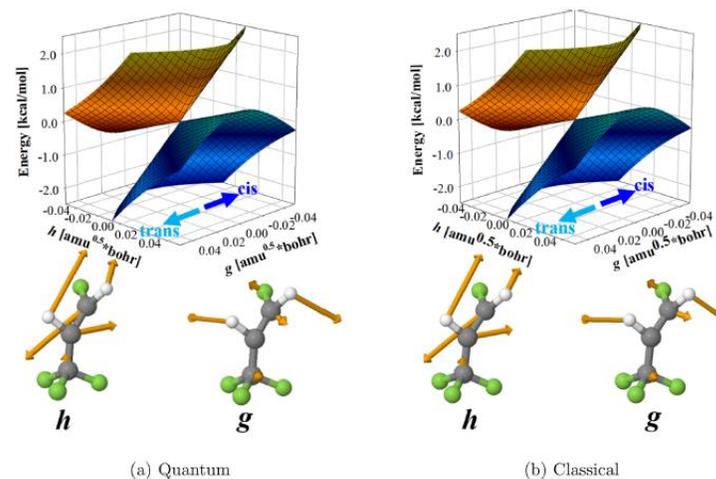
Analytical Energy Gradient for State-Averaged Orbital-Optimized Variational Quantum Eigensolvers and Its Application to a Photochemical Reaction

Keita Omiya,* Yuya O. Nakagawa,* Sho Koh, Wataru Mizukami, Qi Gao, and Takao Kobayashi



アゾベンゼンの結果

- S1 / S2
 - S0 / S2 厳密解
 - S0 / S1
-
- S1 / S2
 - S0 / S2 開発手法
 - S0 / S1

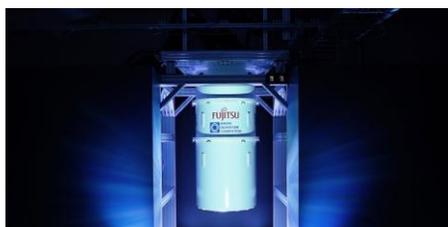


TFP分子のCis-Trans 光異性化反応の 計算結果

2023年10月5日
富士通株式会社
国立研究開発法人理化学研究所

超伝導量子コンピュータを開発し、量子シミュレータ と連携可能なプラットフォームを提供

量子化学計算、量子金融アルゴリズムなどの研究開発を加速



- 理研RQC-富士通連携センターにおいて64量子ビット超伝導量子コンピュータと世界最大級の40量子ビットの量子コンピュータシミュレータを連携させて利用できるハイブリッド量子コンピューティングプラットフォームを開発
- ノイズによるエラーを含む量子コンピュータを用いた計算結果とノイズを含まないシミュレーションによる計算結果の比較などが容易に可能になり、量子アプリケーションにおけるエラー緩和アルゴリズムの性能評価などの研究の加速が期待される

<https://pr.fujitsu.com/jp/news/2023/10/5.html>

・富士フイルム株式会社 解析技術センター 主席研究員 奥野 幸洋氏のコメント

量子コンピュータのもつ超高速計算能力によって、これまでにない高精度な化学計算が可能になると考えられ、材料開発において大きな貢献が期待されます。富士フイルムは、このたび公開されたハイブリッド量子コンピューティングプラットフォームを利用し、現状の量子コンピュータの計算結果に対するノイズ影響などを調べるとともに、未来を見据えて、量子コンピュータによる材料計算への応用を進めることで、革新的な材料開発につなげていきます。

・東京エレクトロン株式会社 デジタルデザインセンター 部長 守屋 剛氏のコメント

量子コンピュータは、計算化学分野において、これまでのコンピュータには不可能であった高精度な計算を実行できるポテンシャルをもっています。東京エレクトロンは、半導体製造プロセス開発および材料開発に量子コンピュータを活用するためのフィジビリティスタディの一環として本共同研究を進めています。

・みずほ第一フィナンシャルテクノロジー株式会社 フィナンシャルエンジニア 金子 和哉氏のコメント

量子アプリケーションや誤り訂正アルゴリズムの性能評価、デモンストレーションにおいて、量子回路デバイスと大規模な量子回路シミュレータは研究上欠かせないものです。みずほ第一フィナンシャルテクノロジーは、本共同研究を通して金融工学分野およびデータサイエンス分野でのアプリケーションに向けた基盤技術を確立し、量子コンピューティングの社会実装を目指しております。

・三菱ケミカルグループ株式会社 Science & Innovation Center, Materials Design Laboratory 上席主幹研究員 高 玘氏のコメント

従来の新規材料の開発や創薬には莫大なコストと時間を要する課題がありました。弊社はこの課題の解決策として、量子コンピュータを活用し、より迅速かつ精度の高い研究開発を行える体制の構築に取り組んでいます。

その一環として富士通と共同研究を実施しており、将来的には大規模な量子コンピューティングを他のエマージングテクノロジーと組み合わせ、材料開発や創薬分野におけるイノベーションの創出を目指していきます。



PsiQuantumが三菱UFJフィナンシャル・グループ(MUFG)および三菱ケミカルと共同で、Qclimateイニシアチブのもとパートナーシップを開始した。この共同プロジェクトはPsiQuantumのFTQC(Fault-Tolerant Quantum Computer/誤り耐性量子コンピュータ)技術を活用し、フォトクロミック分子の励起状態をモデル化・解析することを目的とする。これらの分子は、スマートウィンドウ、エネルギー効率の高いデータストレージ、太陽エネルギー貯蔵などの応用に大きな可能性を秘めている。PsiQuantumが主導し、MUFGが関与するQclimateパートナーシップは、気候技術、特にエネルギー効率の高い材料の開発における複雑な計算課題に対処するために量子技術を活用することに焦点を当てている。

具体的には、**エネルギー効率に優れた光スイッチング用途のジアリールエテン (diarylethene)を中心に、初期世代のFTQCで励起状態の特性を高精度に推定することの実現可能性を評価する。**三菱ケミカルの化学計算の専門知識とPsiQuantumの量子コンピュータの能力を組み合わせることで、この分野の複雑な物理の理解を進め、革新的でエネルギー効率の高いフォトニクス材料への道を開くことを目指す。

<https://www.psiquantum.com/news-import/psiquantum-mitsubishi-ufj-financial-group-and-mitsubishi-chemical-announce-partnership-to-design-energy-efficient-materials-on-psiquantums-fault-tolerant-quantum-computer>

SIP (Cross-ministerial Strategy Innovation promotion Program)の概要

<SIPの特徴>

- 総合科学技術・イノベーション会議が、社会的に不可欠で、日本の経済・産業競争力にとって重要な課題、プログラムディレクター（PD）及び予算をトップダウンで決定。
- 府省連携による分野横断的な取組を産学官連携で推進。
- 基礎研究から実用化・事業化までを見据えて一気通貫で研究開発を推進。規制・制度、特区、政府調達なども活用。国際標準も意識。
- 企業が研究成果を戦略的に活用しやすい 知財システム。

<過去のSIP>

- 平成26年度から平成30年度まで5年間で第1期を実施。研究課題は11。
事業の総予算額 1,580億円
- 平成30年度から令和4年度まで5年間で第2期を実施。研究課題は12。
事業の総予算額 1,445億円

Promoting the application of advanced quantum technology platforms to social issues

Quantum computing	Quantum security/network	Quantum sensing	Innovation Platform
<p>Classic-Quantum Hybrid Testbed</p> 	<p>Infrastructure using quantum secure cloud</p>  <p>Use case development</p> <p>Secure calculation, etc.</p> 	<p>Usage/test/evaluation environment</p>  <p>Use case development</p> <p>Building a space-time business platform</p> 	<p>Startup creation & support</p>  <p>Idea discovery</p> <p>Education program</p>  <p>Build-up Ecosystem</p> 

SIPプロジェクト

- 古典/量子のMI (Materials informatics) 手法を開発し、高精度の材料設計AI技術の確立を目指す。



次世代材環境料開発を加速し
カーボンニュートラルに貢献

出典: 内閣府量子未来社会ビジョン ~量子技術により目指すべき未来社会ビジョンとその実現に向けた戦略~

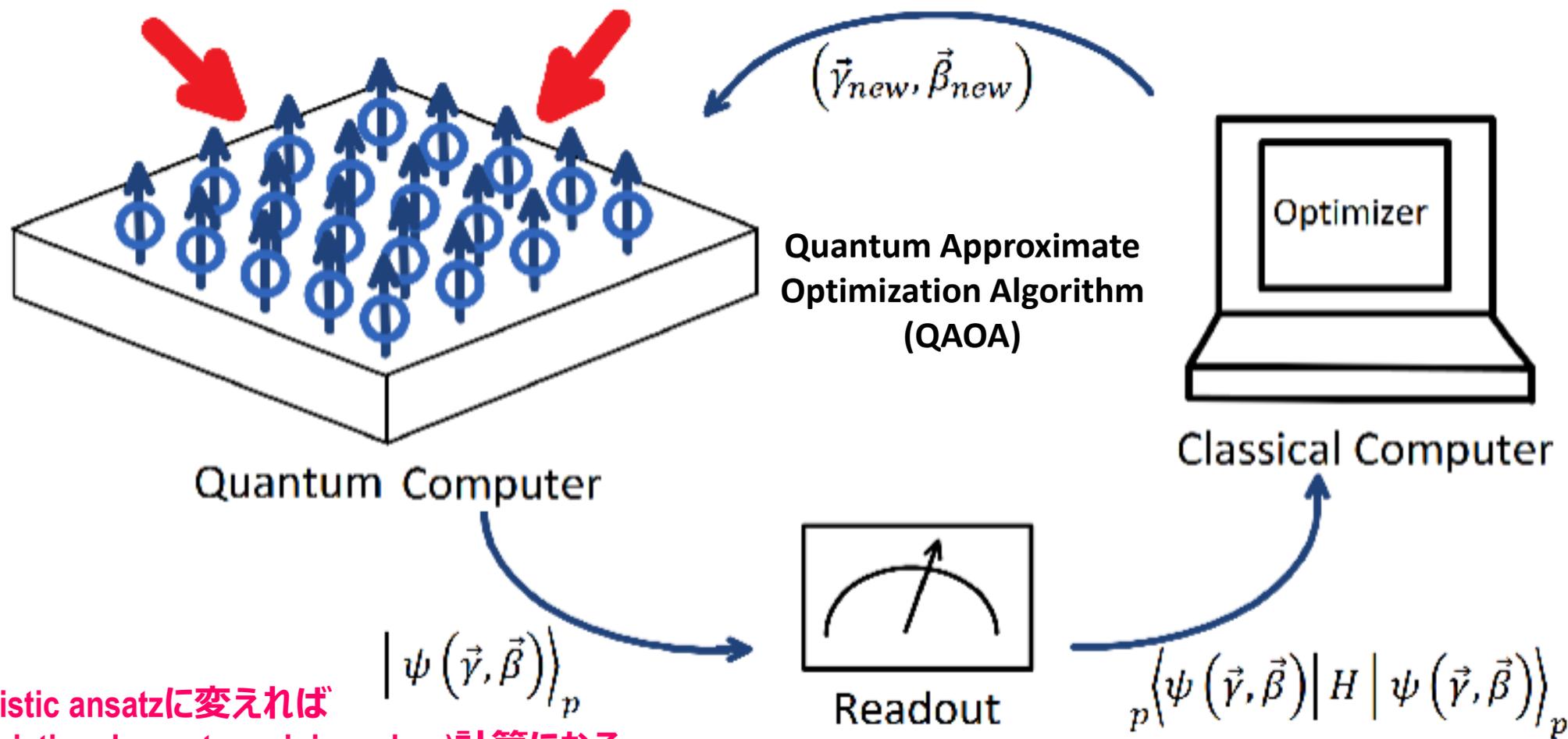
量子コンピュータを用いたMaterials informatics

- ✓ 計算と実験両方のアプローチを融合し、材料開発に必要な期間とコスト低減の実現。
- ✓ 量子コンピュータは高速で候補材料の探索に適用することは期待されている。



出典: 内閣府量子未来社会ビジョン ~量子技術により目指すべき未来社会ビジョンとその実現に向けた戦略~

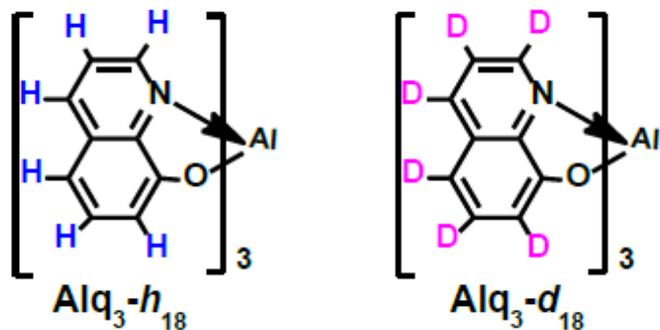
✓ QAOA 最適化アルゴリズム。



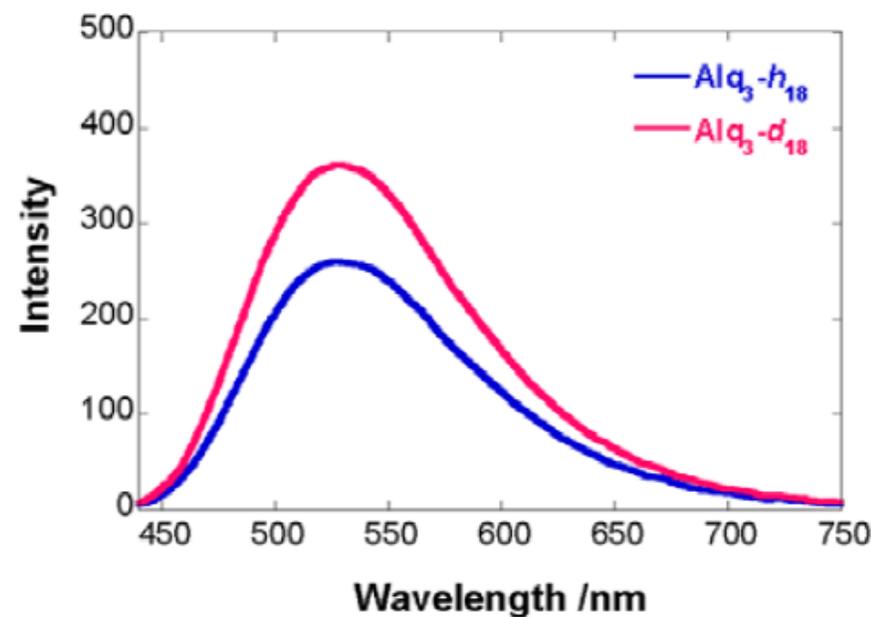
* Heuristic ansatzに変えれば
VQE(variational quantum eigensolver)計算になる

有機ELの同位体材料探索

- ✓ H原子を同位体のD原子に置き換えることで、無輻射速度は抑えられ、量子収率が向上する。
- ✓ 応用: OLEDディスプレイや診断用イメージセンサー。
- ✓ 課題: 合成の制限を加えて、最適なD化構造は非自明なことである。
- ✓ 目的: 量子コンピュータを用いて、特定なD数の構造のなか最も発光効率の高い同位体材料の探索。



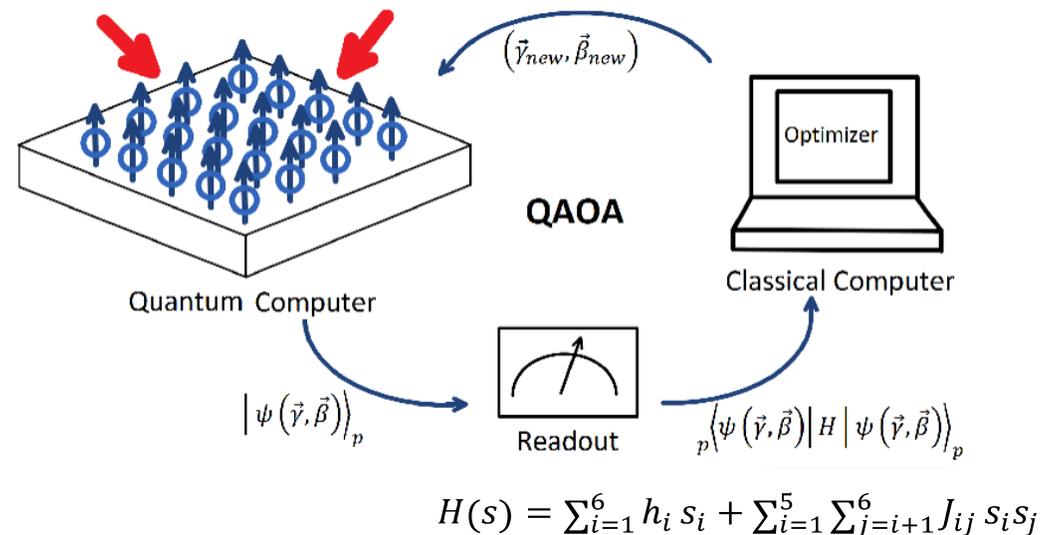
$$\Phi = \frac{k_r}{k_{nr} + k_r}$$



大陽日酸技報 No. 32 (2013)

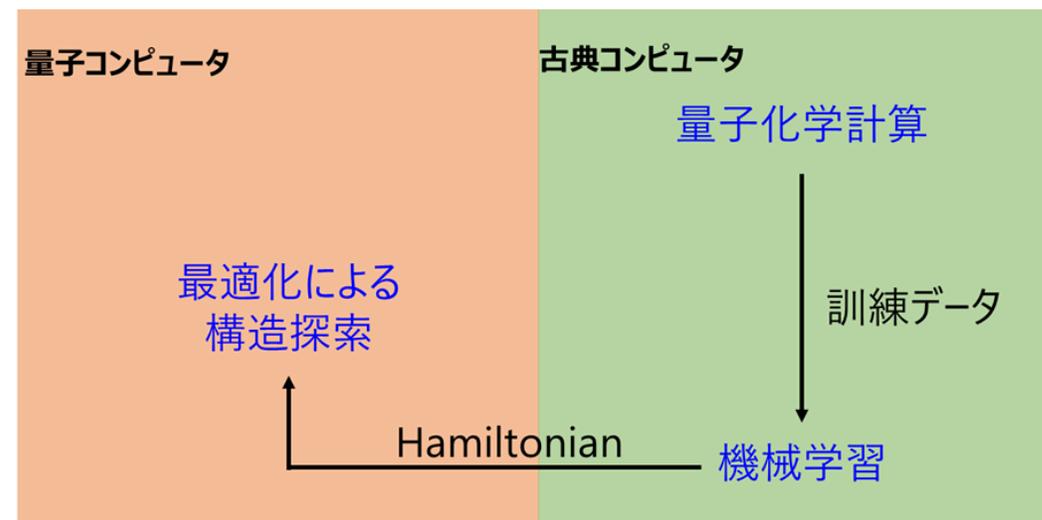
有機ELの同位体材料探索

- ✓ 量子コンピュータは最適化計算に有用であるが材料探索への応用例がなかった。
- ✓ 課題：最適化計算を行うために Hamiltonian を Ising形式で表現する必要がある。



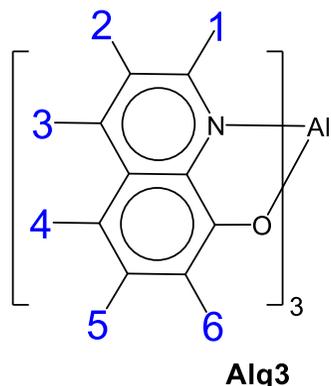
✓ 解決方法：

- 1)古典コンピュータ：機械学習を用いて、物性計算結果からIsing Hamiltonianを構築する。
- 2)量子コンピュータ：構築したHamiltonianを用いて望ましい構造を探索する。



有機ELの同位体材料探索

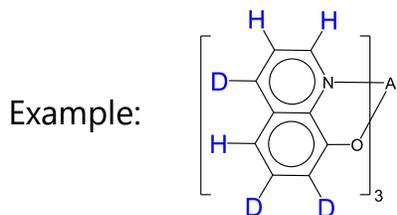
- ✓ Franck-Condon係数の量子化学計算より発光体の無輻射係数を推算する。
- ✓ 計算結果は実験値と同じ傾向を示す。



Quantum yield

$$\Phi = \frac{k_r}{k_{nr} + k_r}$$

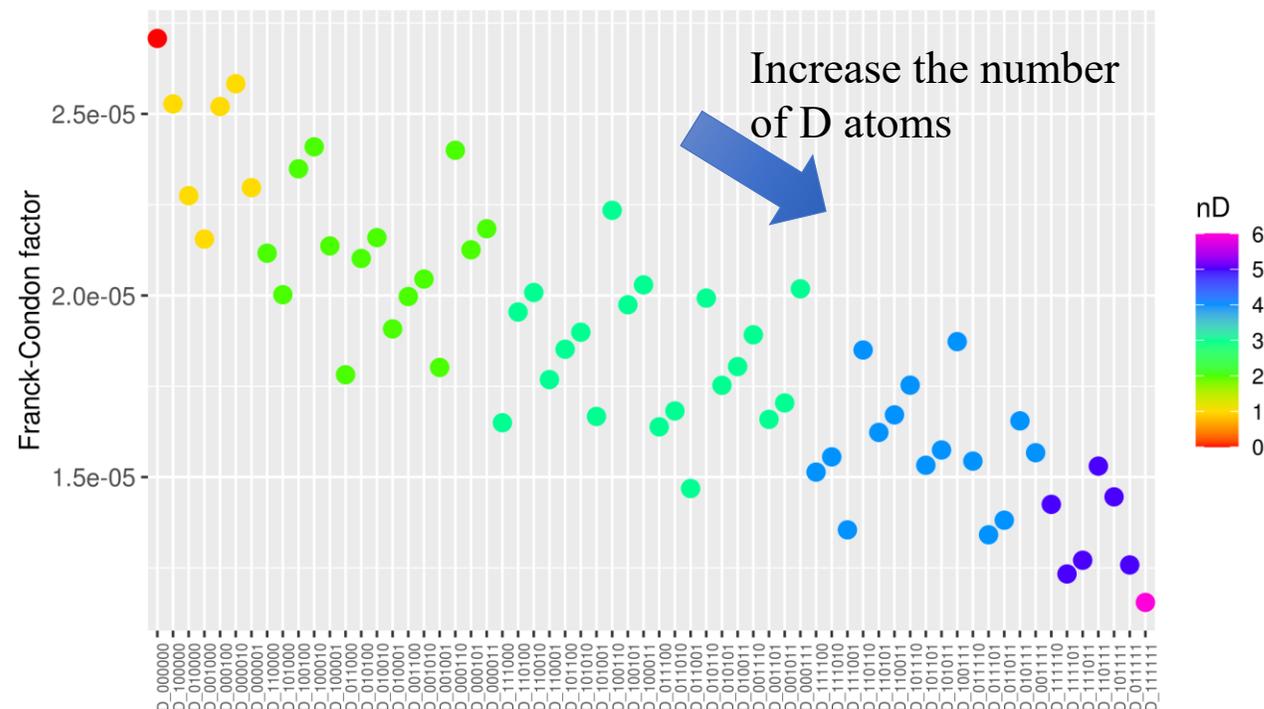
Convert H & D combination as 6qubit combination



H	1	2	3	4	5	6
0/H, 1/D	0	0	1	0	1	1

by MOMAP-V0.3.001 and Gaussian16

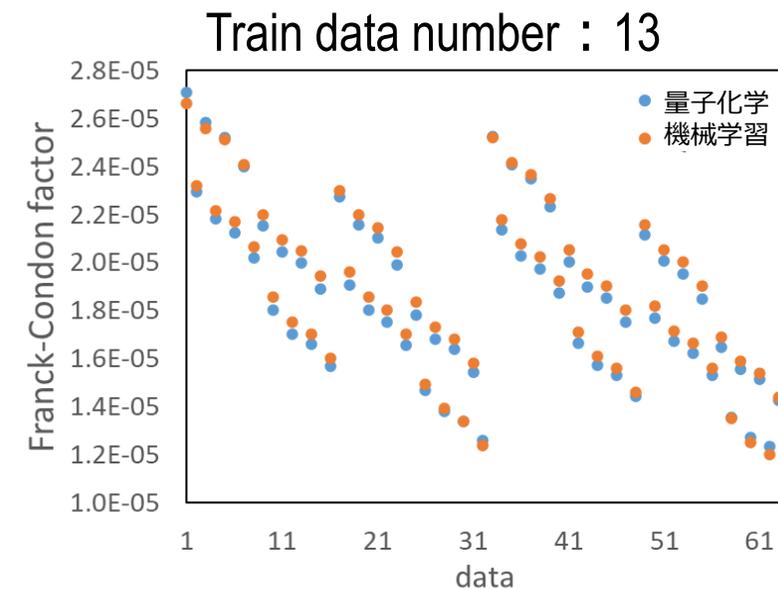
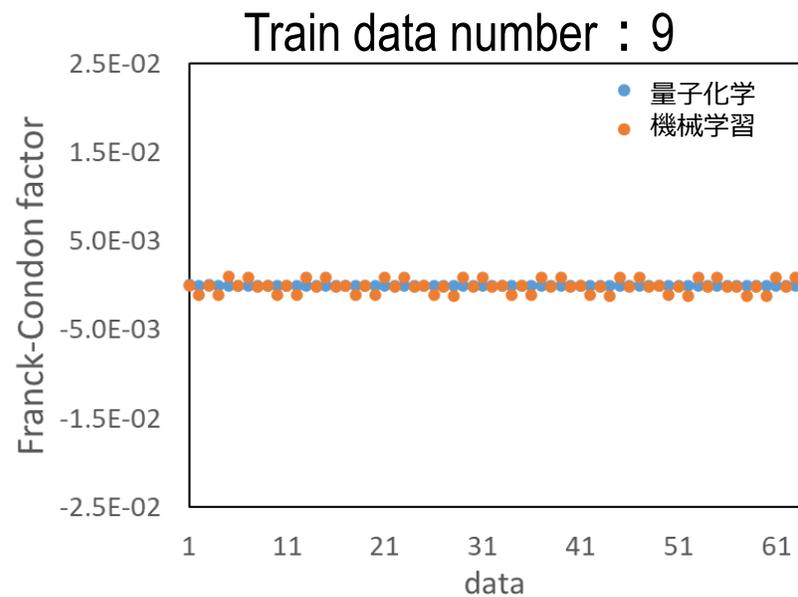
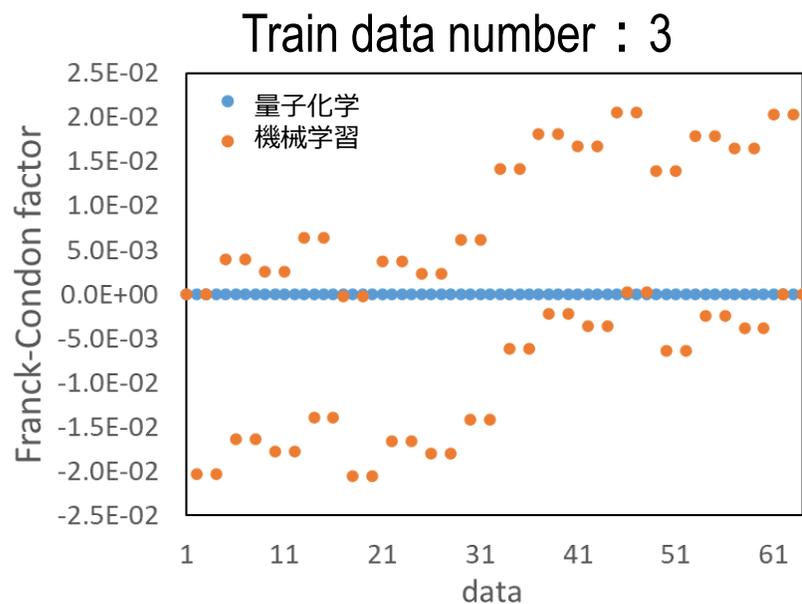
Deuterated position dependence of Franck-Condon factor@300K in S1/S0 nonradiative decay of Alq3 by MOMAP (TD-CAM-B3LYP/6-31G(d,p) level)



6bit: 全部で $2^6=64$ 通り

有機ELの同位体材料探索

✓ 13個の訓練データを用いた機械学習より高精度で全ての同位体構造のFC係数の予測ができた。

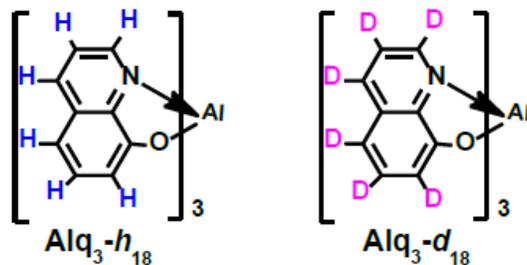


有機ELの同位体材料探索

✓ 2種類の計算を実施した

- 1) 全て(64通り)のD化同位体分子のなか最も高い量子収率を有する構造の探索
- 2) 合成コストを考慮し、D原子が3個の同位体分子のなか最も高い量子収率を有する構造の探索。

✓ シミュレータ(理想な量子コンピュータ)上での計算結果: 完全に基底状態に収束し、望ましい構造の探索に成功した。



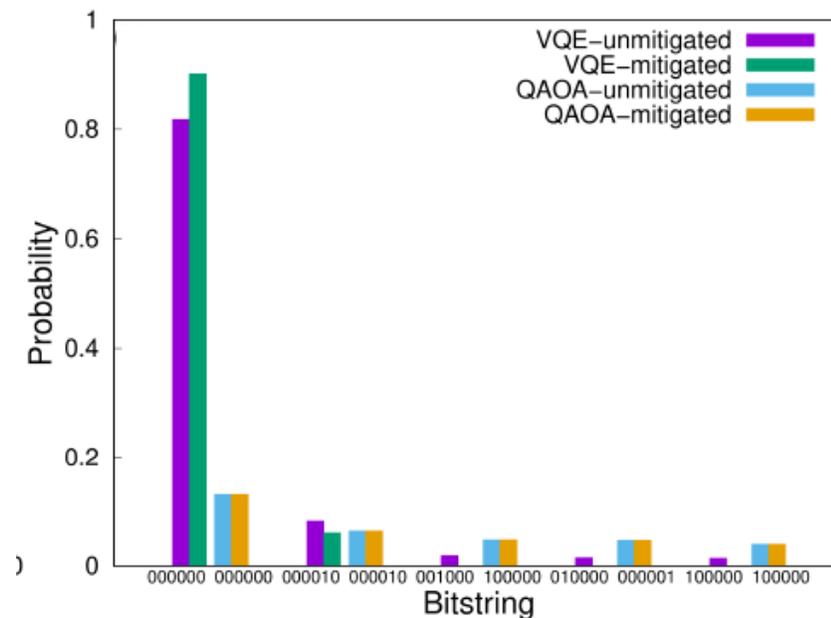
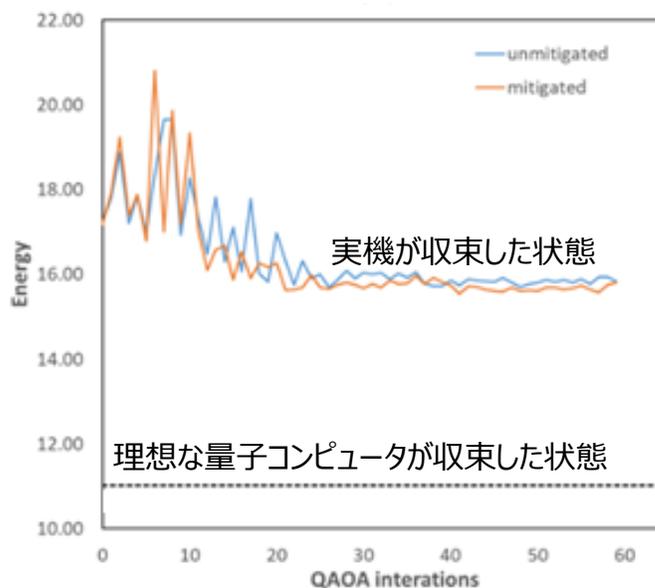
Method	Ground state			Ansätze	
	energy	bitstring	value	CNOTs	opt params
<i>Simulations using unconstrained Ising Hamiltonian</i>					
exact eigensolver	10.984	[000000] (DDDDDD)	1.00		
VQE	10.984	[000000] (DDDDDD)	1.00	5	12
QAOA ($p = 1$)	13.170	[000000] (DDDDDD)	0.44	30	2
QAOA ($p = 2$)	12.041	[000000] (DDDDDD)	0.65	60	4
QAOA ($p = 3$)	11.026	[000000] (DDDDDD)	0.97	90	6
<i>Simulations using constrained Ising Hamiltonian</i>					
exact eigensolver	14.948	[100110] (HDDHHD)	1.00		
VQE	14.948	[100110] (HDDHHD)	1.00	5	12
QAOA ($p = 1$)	21.870	[100110] (HDDHHD)	0.46	30	2
QAOA ($p = 2$)	19.589	[100110] (HDDHHD)	0.68	60	4
QAOA ($p = 3$)	19.569	[100110] (HDDHHD)	0.78	90	6
QAOA ($p = 4$)	15.388	[100110] (HDDHHD)	0.95	120	8

有機ELの同位体材料探索

✓ 実機ノイズの影響を受けて、完全に基底状態に収束できなかったが収束した状態のなか望ましい構造は最も高い確率で現れ、有益な情報は得られた。

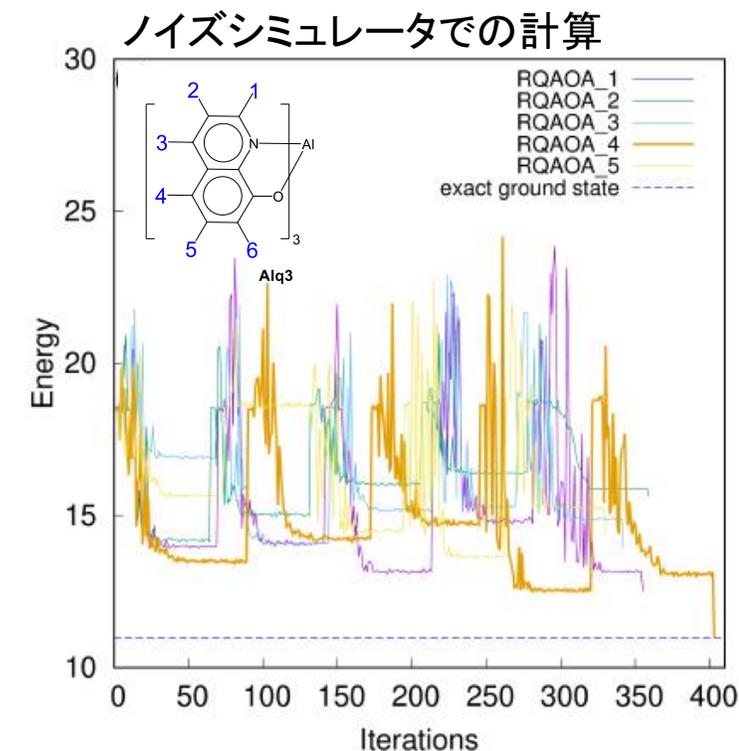
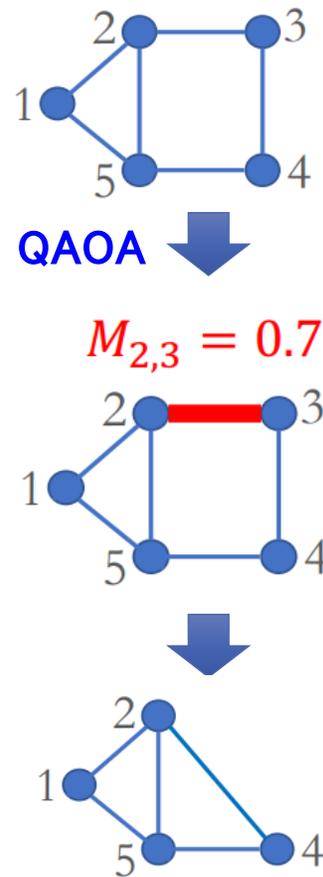
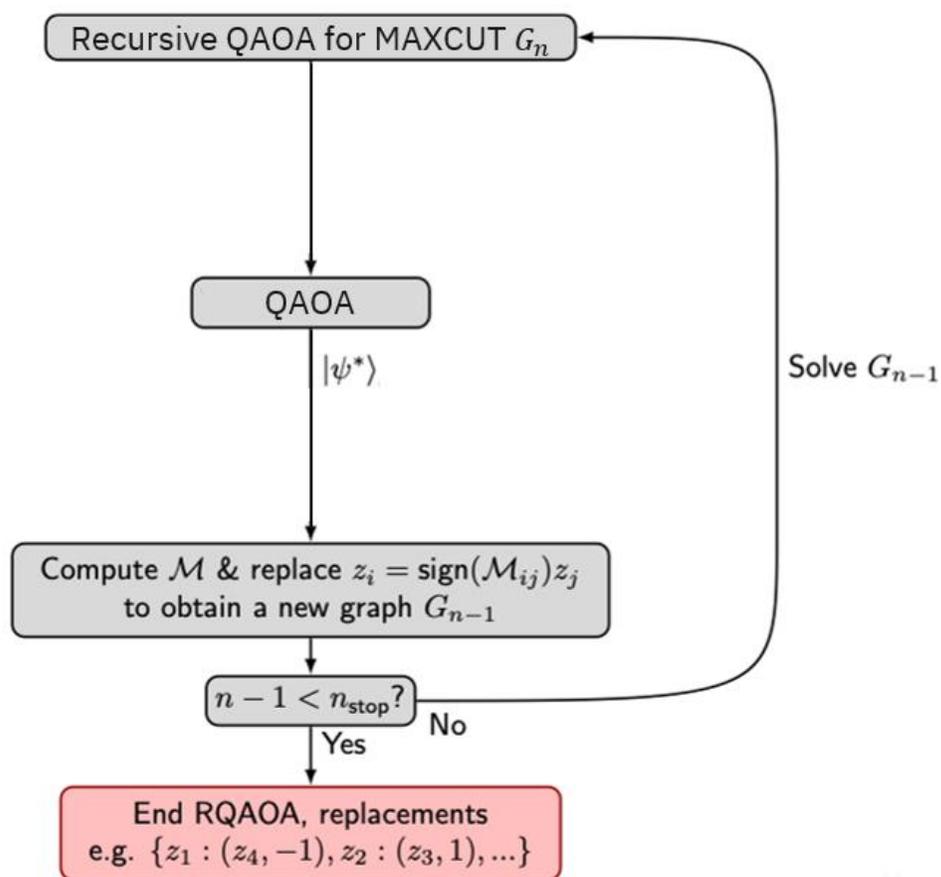


ibm_kawasaki (日本企業の専用マシン) でのQAOA最適化計算



有機ELの同位体材料探索

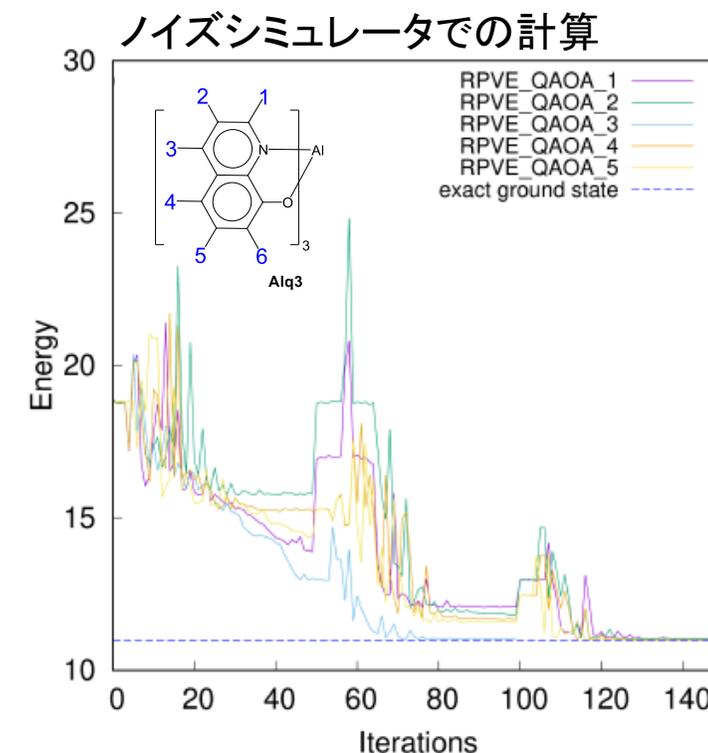
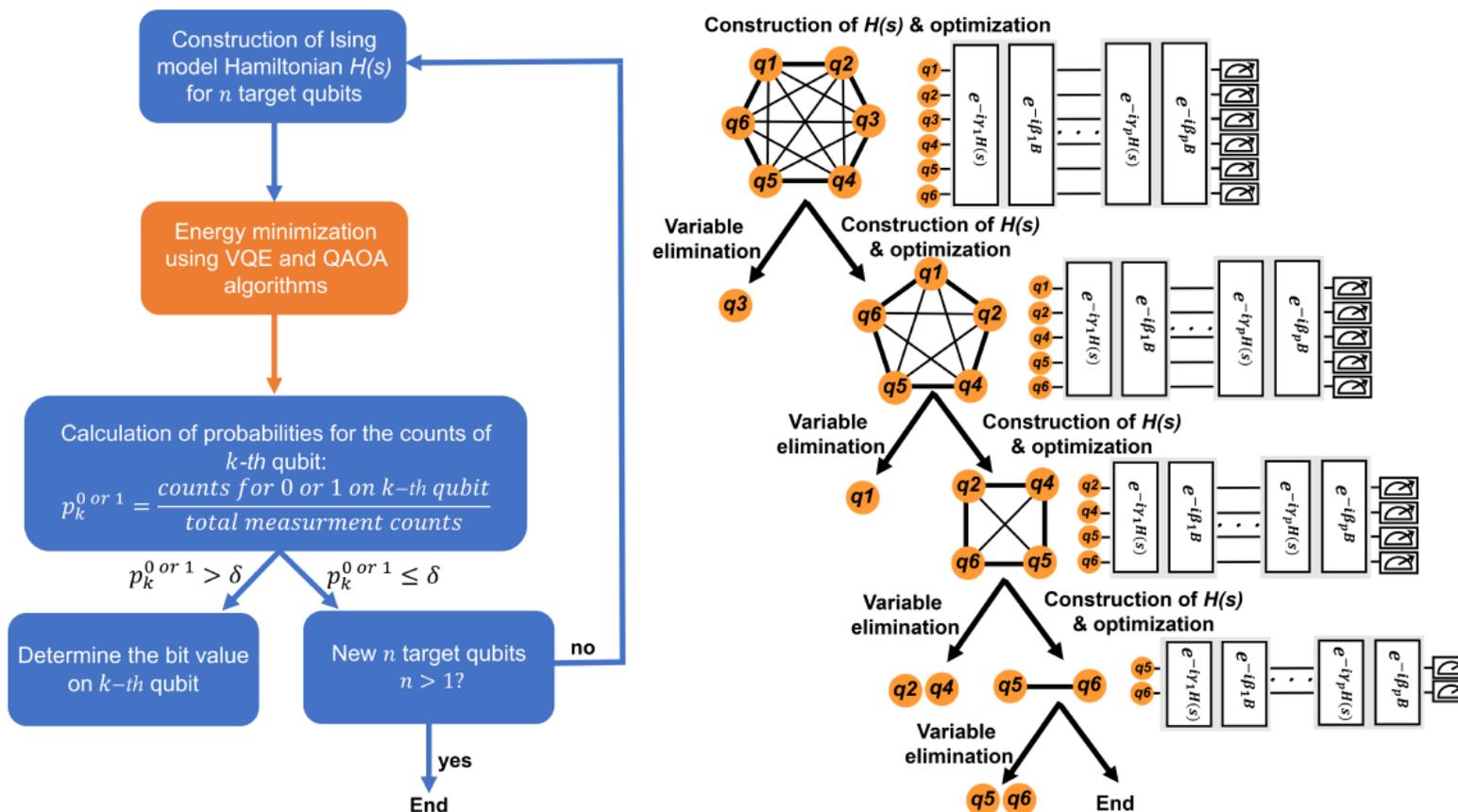
- ✓ 実機計算の精度を向上するために、IBMが提唱するRQAOA法を試みたが精度向上は得られなかった。
- ✓ RQAOA法はQubit間の相関を判断基準にQubitの値を決める手法である。
- ✓ RQAOA法はグラフ問題に有効が有機EL材料(Qubit間の相関が弱い系)の探索に適しない。



Phys. Rev. Lett. 125, 260505 (2020)

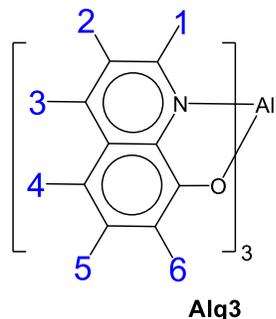
有機ELの同位体材料探索

- ✓ RQAOA法と同様に逐次的にQubit値を決めるRPVE法を考案した
- ✓ Qubitの値が現れる確率を判断基準にQubitの値を決める手法である。
- ✓ ノイズシミュレータ上で精度向上の結果は得られた。

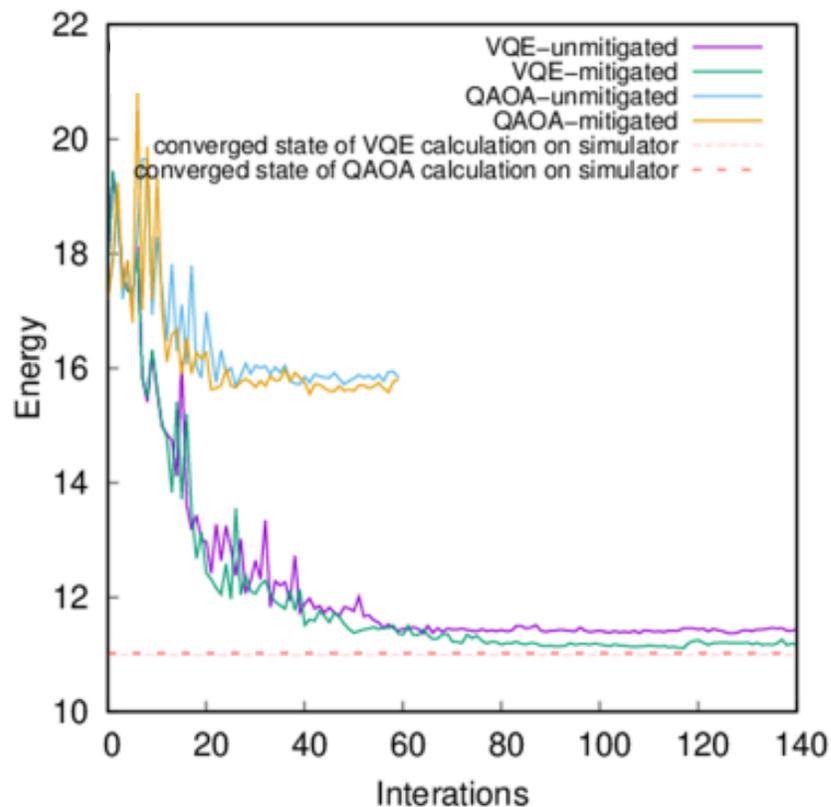


有機ELの同位体材料探索

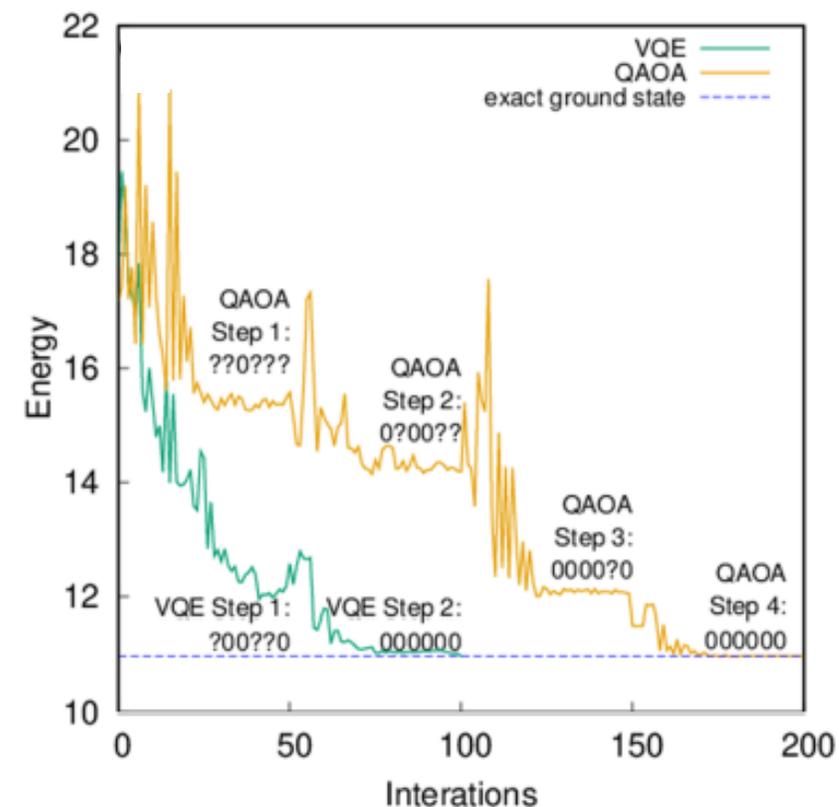
- ✓ RQAOA法と同様に逐次的にQubit値を決めるRPVE法を考案した
- ✓ Qubitの値が現れる確率を判断基準にQubitの値を決める手法である。
- ✓ ノイズシミュレータ上で精度向上の結果は得られた。



従来のQAOAとVQE法の計算結果



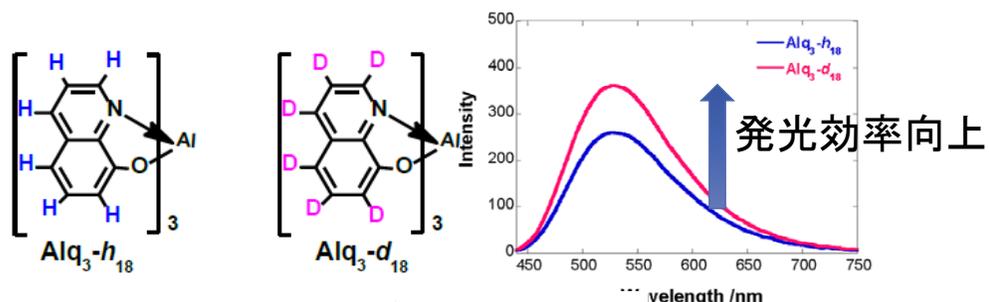
RPVEのQAOAとVQE法の計算結果



有機ELの同位体材料探索

纏め:

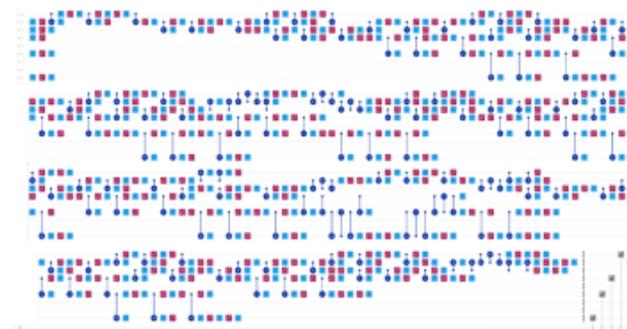
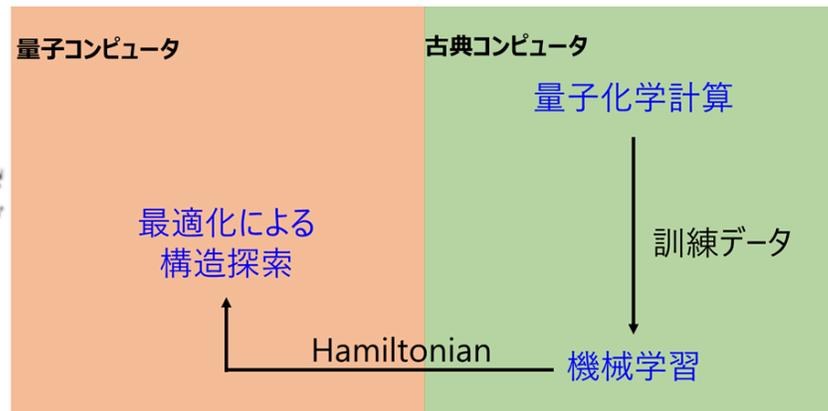
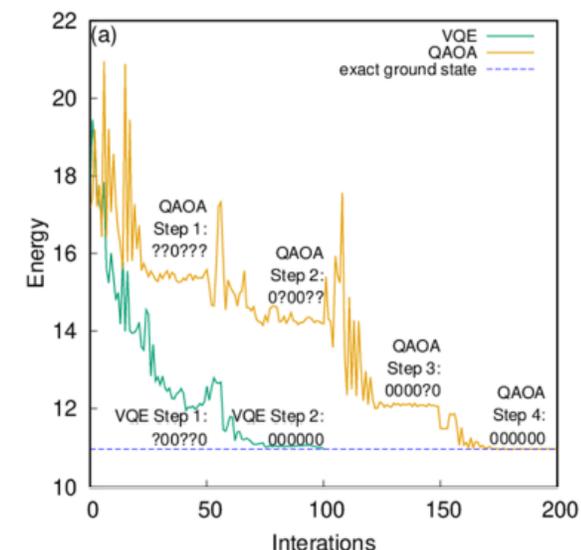
- ✓ 目的:量子コンピュータをMI(material informatics)に適用する道筋の確立。
- ✓ 協業: Keio University, IBM
- ✓ 成果:量子と古典のハイブリット手法を考案し、IBM実機(ibm_kawasaki)上高い発光性能の有機EL同位体の構造探索に成功。



$$H(s) = \sum_{i=1}^6 h_i s_i + \sum_{i=1}^5 \sum_{j=i+1}^6 J_{ij} s_i s_j$$



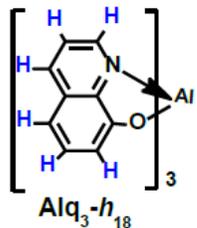
ibm_kawasakiでの最適化計算



有機ELの同位体材料探索

纏め:

- ✓ 目的:量子コン
 - ✓ 協業: Keio Unive
 - ✓ 成果:量子と古
- 位体の構造探索



$$H(s) = \sum_{i=1}^6$$

量子コンピュータ

最適化
構造

Intelligent Computing

A SCIENCE PARTNER JOURNAL

Publishment with IBM and Keio

RESEARCH ARTICLE

Quantum-Classical Computational Molecular Design of Deuterated High-Efficiency OLED Emitters

Qi Gao^{1,2*}, Gavin O. Jones^{3*}, Takao Kobayashi^{1,2}, Michihiko Sugawara², Hiroki Yamashita¹, Hideaki Kawaguchi², Shu Tanaka^{2,4}, and Naoki Yamamoto^{2,4*}

¹Mitsubishi Chemical Corporation, Science & Innovation Center, 1000, Kamoshida-cho, Aoba-ku, Yokohama 227-8502, Japan. ²Quantum Computing Center, Keio University, Hiyoshi 3-14-1, Kohoku, Yokohama 223-8522, Japan. ³IBM Quantum, IBM Research - Almaden, 650 Harry Road, San Jose, CA 95120, USA. ⁴Department of Applied Physics and Physico-Informatics, Keio University, 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa 223-8522, Japan.

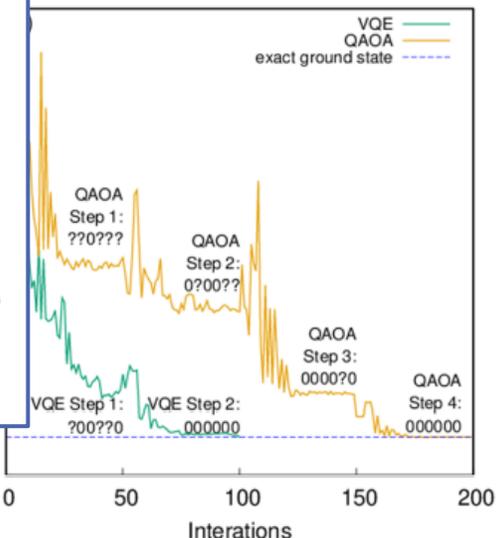
Hamiltonian

機械学習



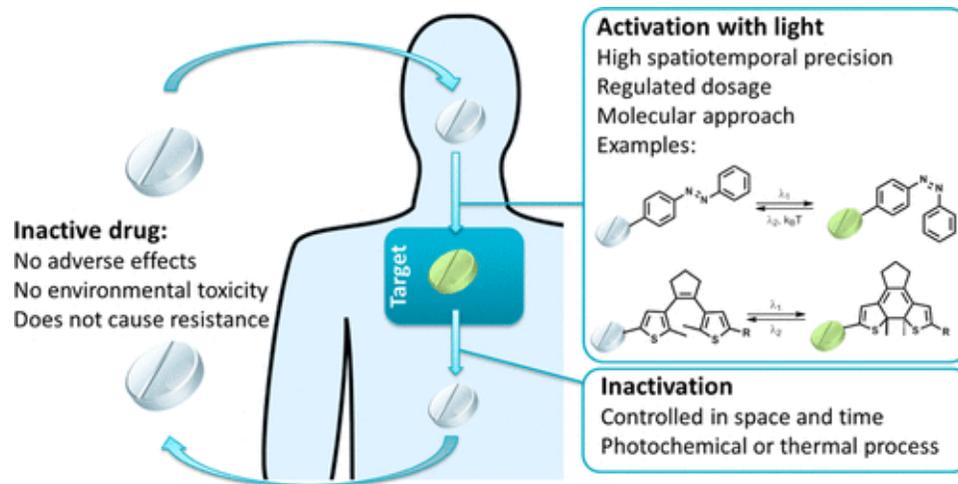
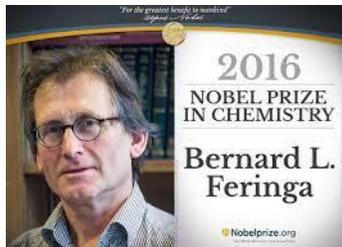
発光性能の有機EL同

awasakiでの最適化計算

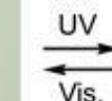
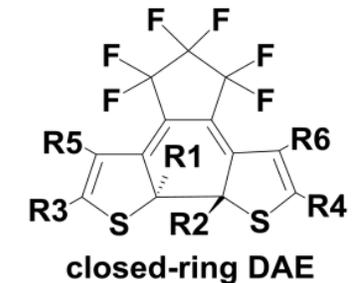
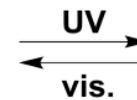
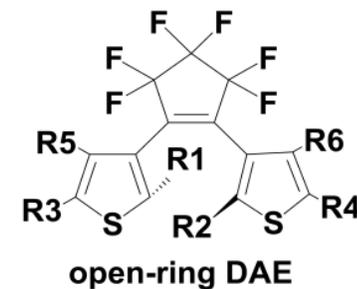


フォトクロミック材料の探索

- ✓ 薬剤に光スイッチ材料を導入することで、光照射によって薬剤の活性を制御する。
- ✓ DAE分子は有望な光スイッチであるが使用するUV光は身体にダメージがある。
- ✓ 本研究は身体へのダメージを低減するため、4096 (=2¹²) のDAE分子候補構造から長波長吸収の光スイッチ材料を探索することを目的とする。



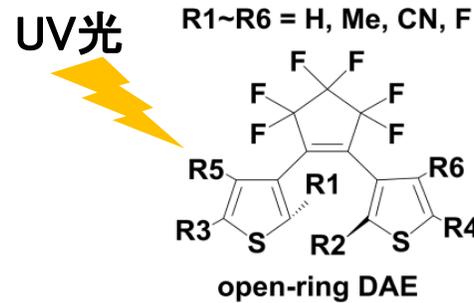
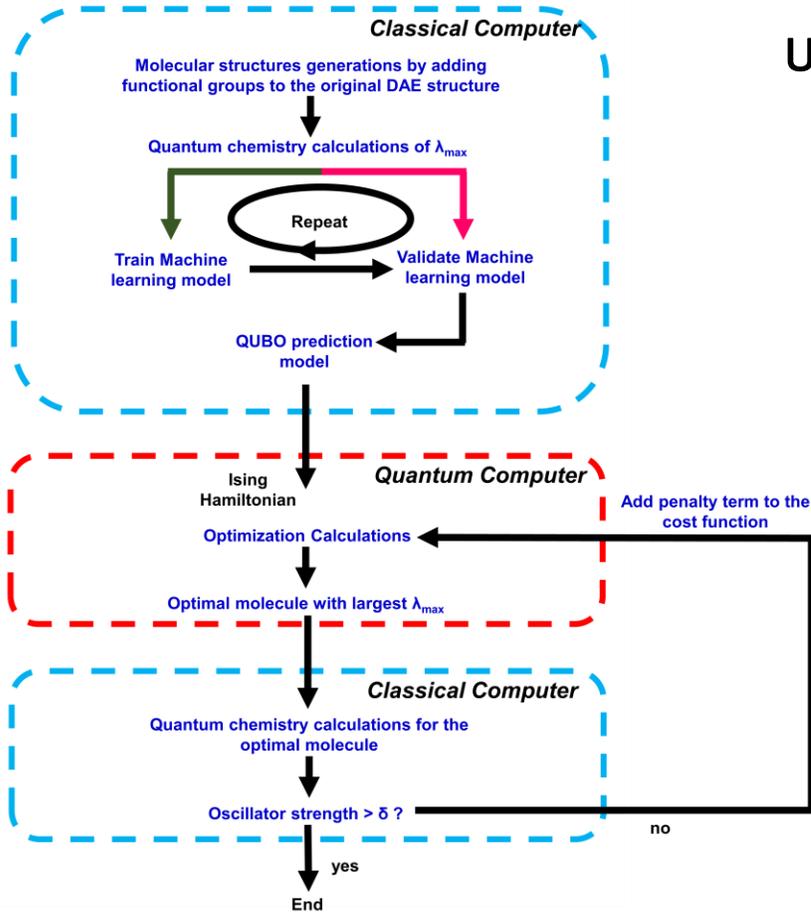
R1~R6 = H, Me, CN, F



J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 6, 2178–2191

フォトクロミック材料の探索

- ✓ 量子の最適化計算と古典のAIを組み合わせる材料探索のスキームを考案した。
- ✓ cVQD手法を考案し、数個の候補材料の探索を可能にした。



置換基	2qubit
CN	00
F	01
H	10
Me	11

X

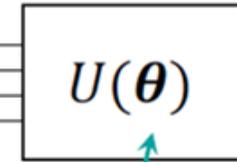
置換場所
R1
R2
R3
R4
R5
R6

=12qubit

cVQD手法

Reference State

$|\Psi_0\rangle$



$|\Psi(\theta)\rangle$

minimize

$$C_1(\theta) = E(\theta) + \beta_0 |\langle \Psi(\theta) | \Psi_0 \rangle|^2$$

$$|\langle \Psi(\theta) | \Psi_0 \rangle|^2 = |\alpha_{k_0}(\theta)|^2$$

$$E(\theta) = \langle \Psi(\theta) | \hat{H} | \Psi(\theta) \rangle$$

Total 4096 species

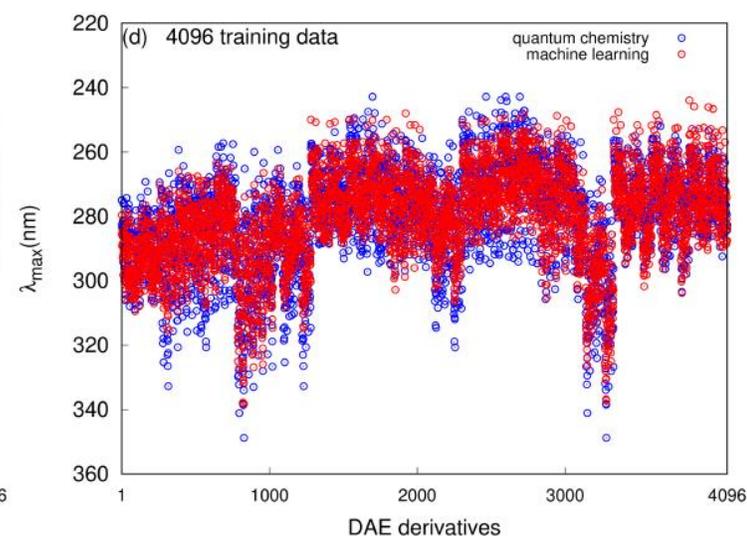
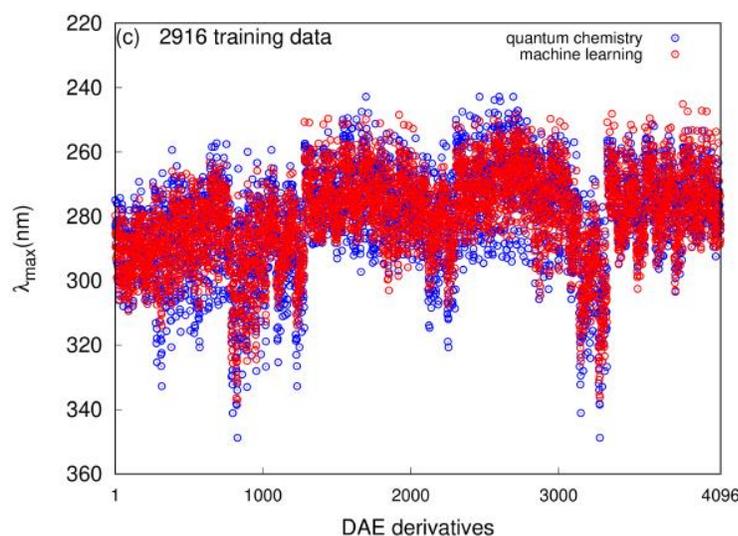
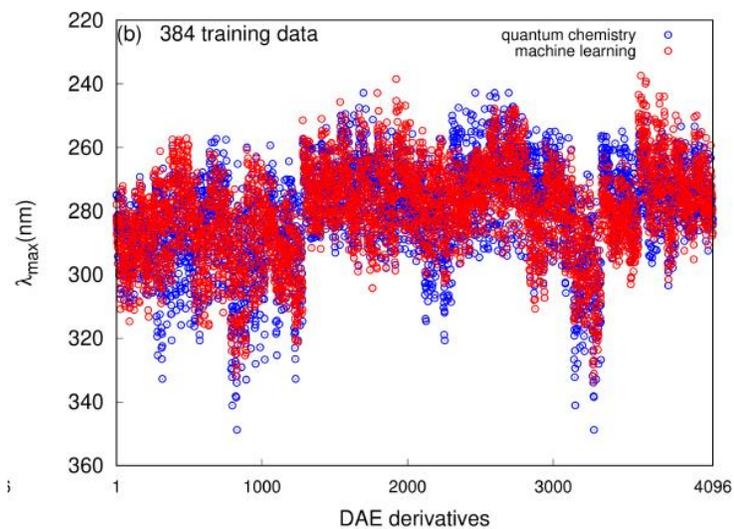
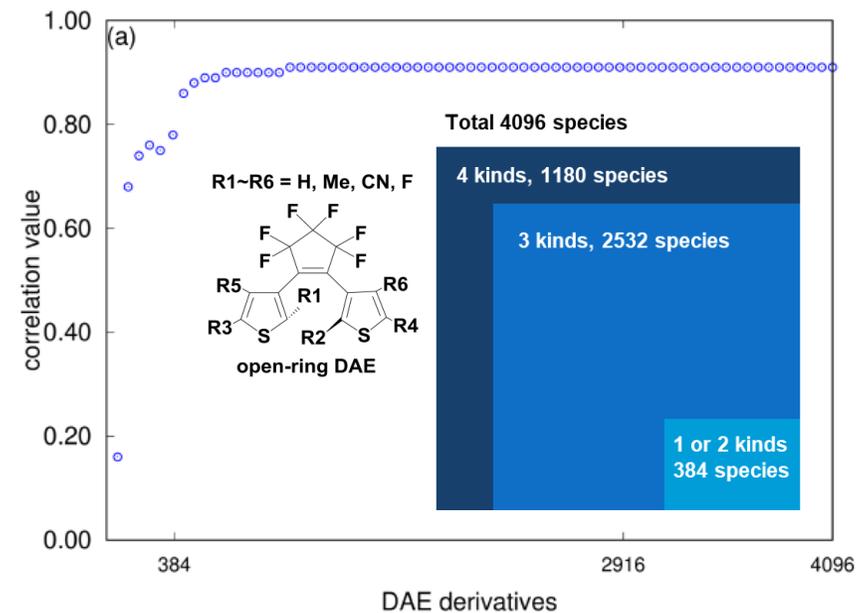
4 kinds, 1180 species

3 kinds, 2532 species

1 or 2 kinds
384 species

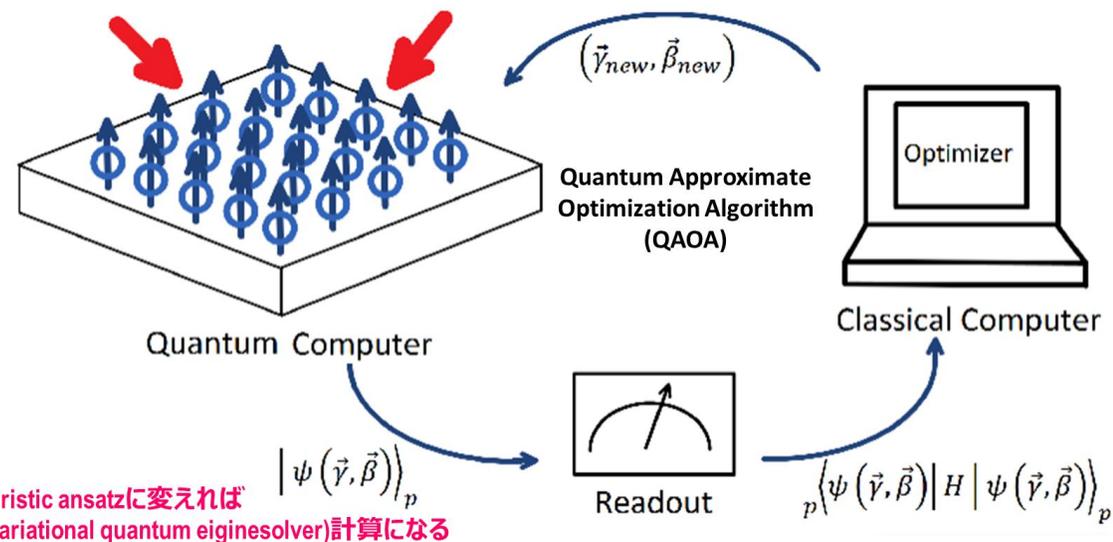
フォトクロミック材料の探索

- ✓ AI学習精度は訓練データの増加に従って高くなる。
- ✓ 600個の訓練データを使用することで学習精度は飽和する。
- ✓ 2種類の置換基を含むDAE分子を訓練データとして使う場合、それなりよい学習精度は得られる。



フォトクロミック材料の探索

- ✓ 1番吸収波長の長いDAE分子の探索@シミュレータを実施した。
- ✓ VQE計算: 完璧に厳密解に収束し、DAE分子の探索に成功した。
- ✓ QAOA計算: DAE分子の探索に成功したが厳密解と一定の乖離があった。

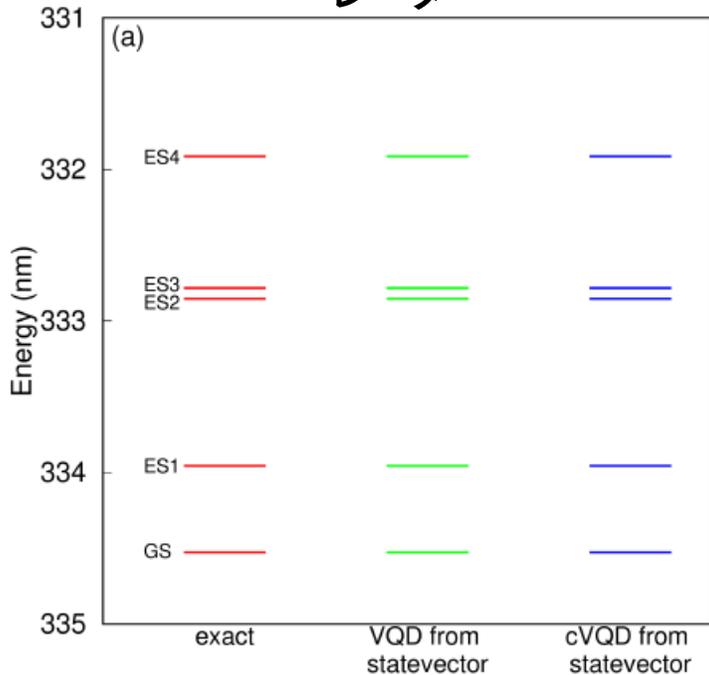


Method	Ground state		
	energy	bitstring (functional groups of R1-R6)	probability
exact eigensolver	334.527	[110011001110] (Me-CN-Me-CN-Me-H)	1.00
VQE	334.527	[110011001110] (Me-CN-Me-CN-Me-H)	1.00
QAOA ($p = 1$)	313.827	[110011001110] (Me-CN-Me-CN-Me-H)	0.05
QAOA ($p = 2$)	323.982	[110011001110] (Me-CN-Me-CN-Me-H)	0.15
QAOA ($p = 3$)	332.051	[110011001110] (Me-CN-Me-CN-Me-H)	0.25

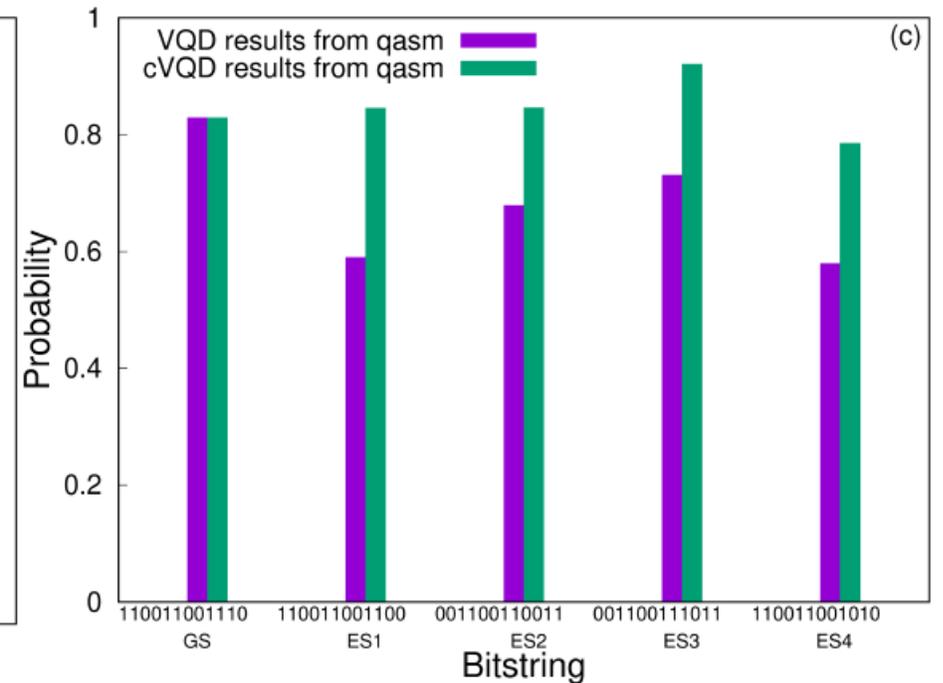
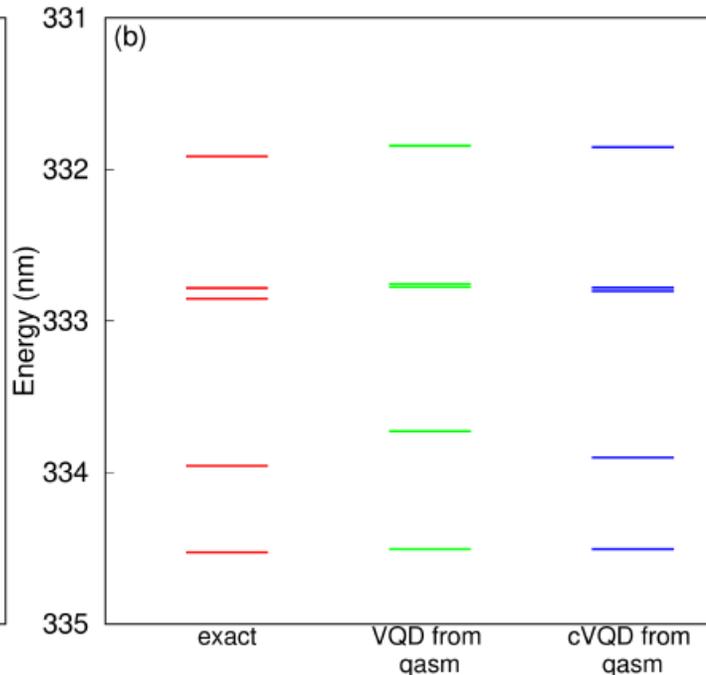
フォトクロミック材料の探索

- ✓ 2～5番吸収波長の長いDAE分子の探索@シミュレータを実施した。
- ✓ 理想なシミュレータ: VQDとcVQD法は共に完璧に厳密解に収束。
- ✓ サンプルングエラーがあるシミュレータ: 開発したcVQD法は従来のVQD法より高い計算精度の結果は得られて、よりノイズに強い手法である。

理想な量子コンピュータシミュレータ

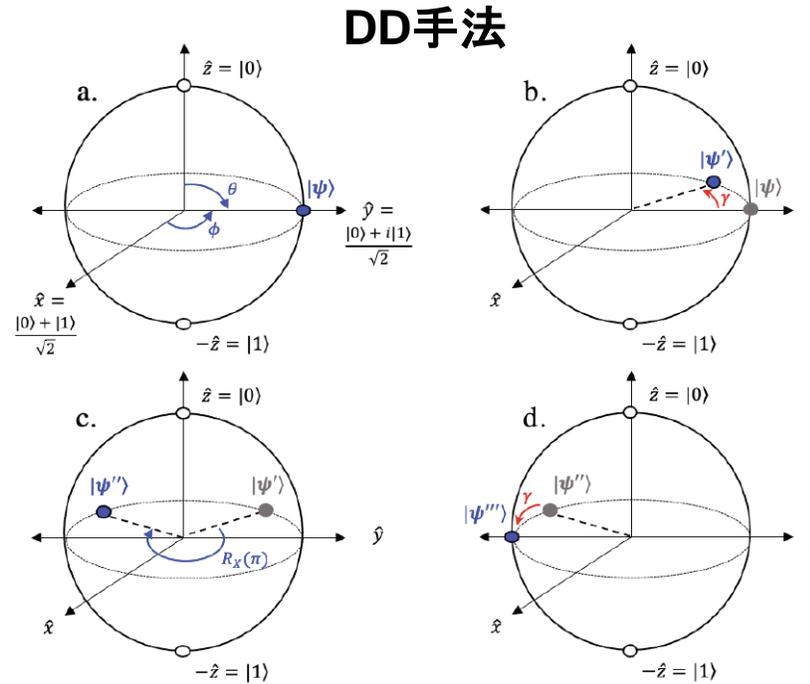
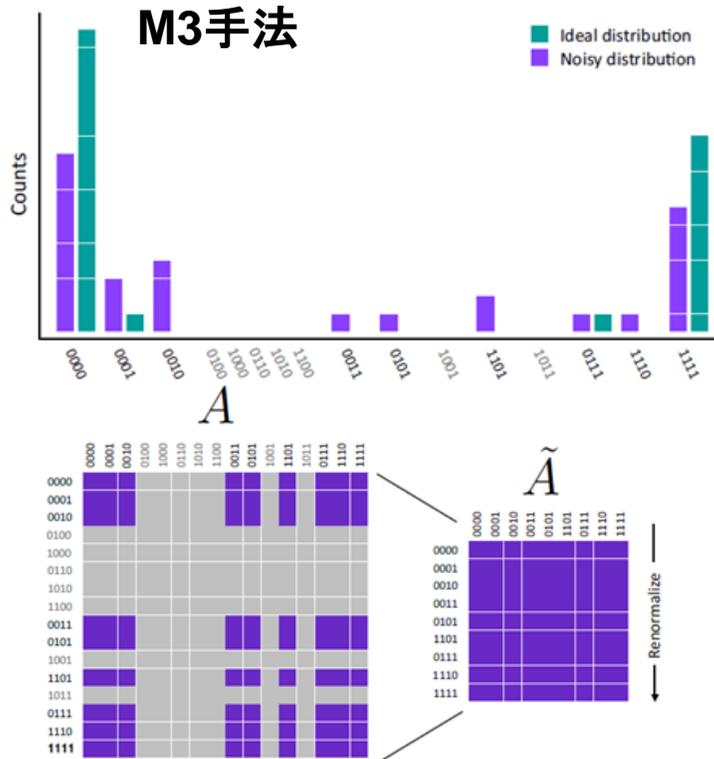


サンプルングエラーがある量子コンピュータシミュレータ

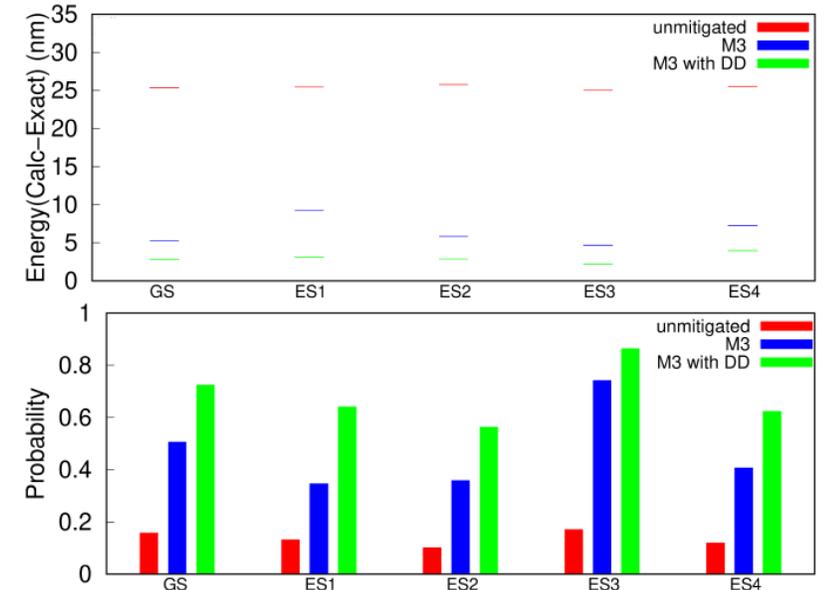


フォトクロミック材料の探索

- ✓ 1～5番吸収波長の長いDAE分子の探索@ibm_kawaskiの計算を実施した。
- ✓ M3手法とDD手法を用いて、実機ノイズの影響（サンプリングエラー、デコヒーレンスエラー）を緩和し、bitstringの確率の計算精度は4～5倍向上した。



M3とDD手法を適用した実機計算結果



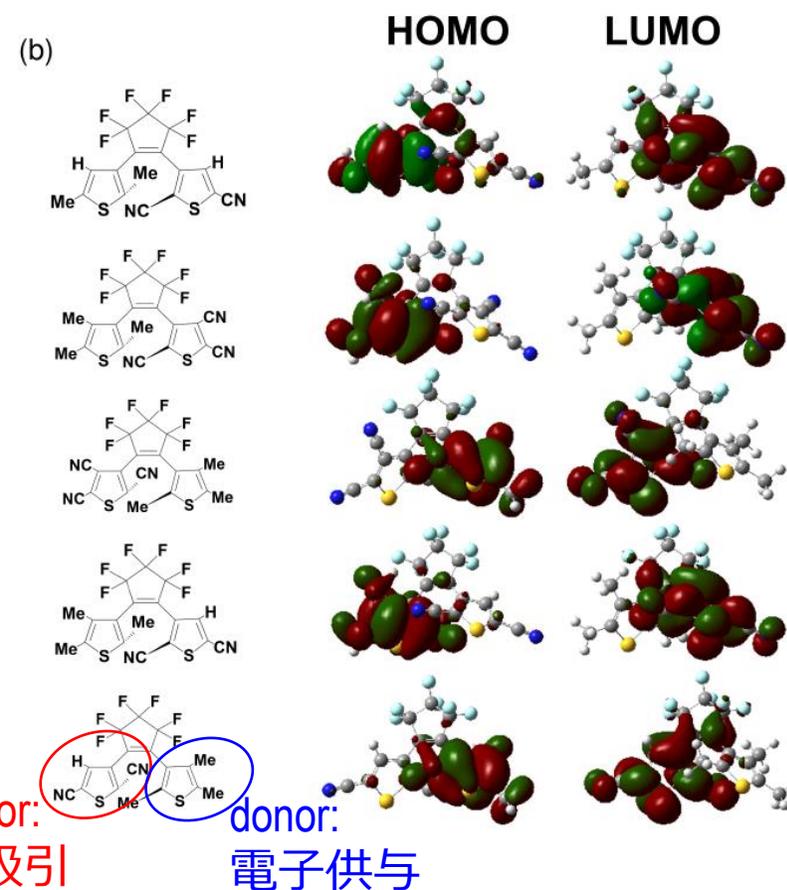
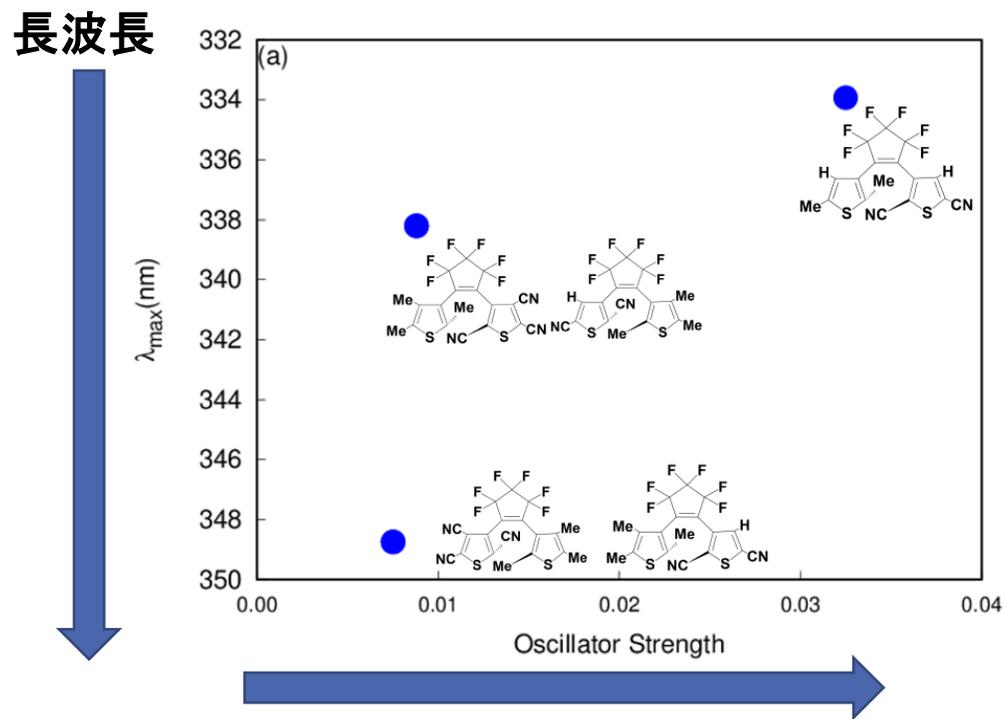
Mathematical, Physical and Engineering
Sciences 370, 4748 (2012)

PRX QUANTUM 2, 040326 (2021)

フォトクロミック材料の探索

- ✓ 電子吸引と電子供与部分の軌道分布は分離することで長波長傾向。
- ✓ 電子吸引と電子供与部分の軌道分布は重なることで高い光吸収効率傾向。

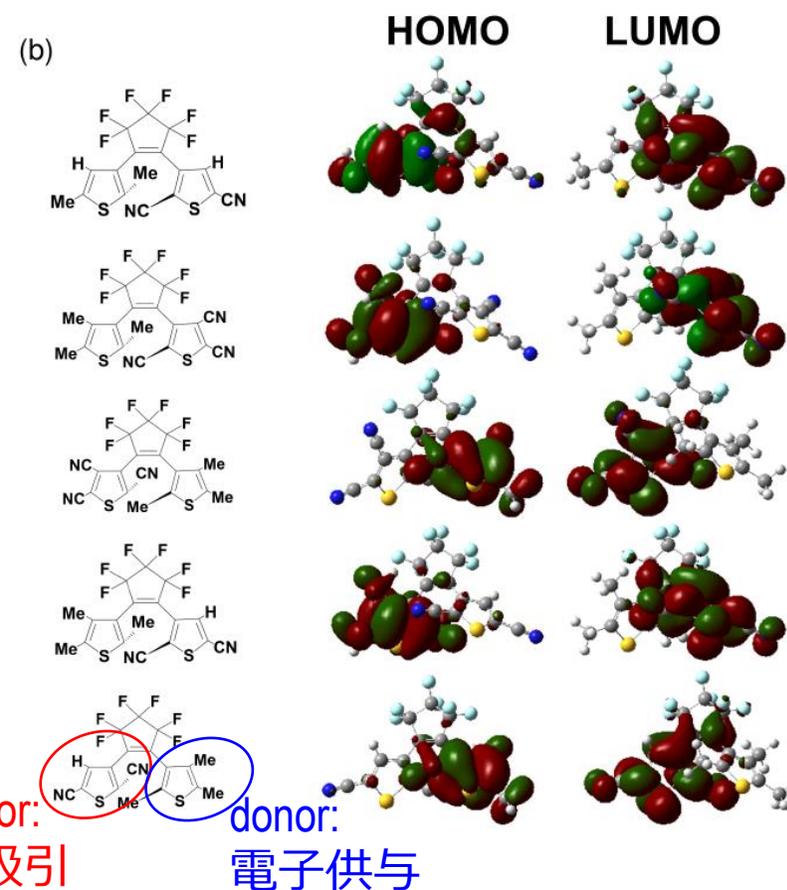
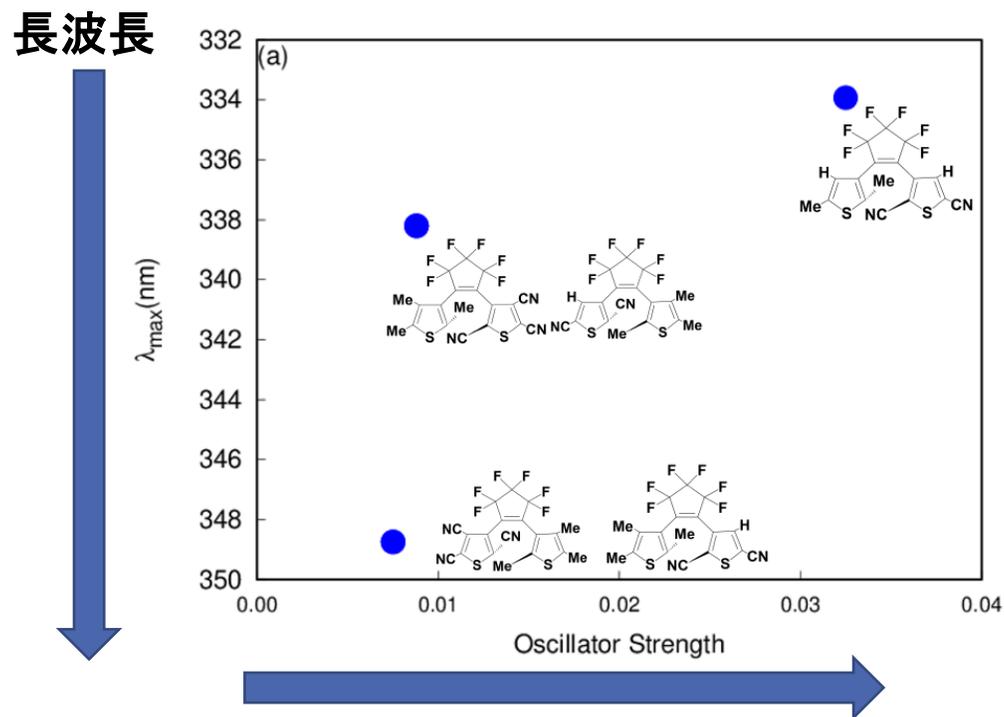
ほどよい軌道分布のDAE材料は望ましい



フォトクロミック材料の探索

- ✓ 電子吸引と電子供与部分の軌道分布は分離することで長波長傾向。
- ✓ 電子吸引と電子供与部分の軌道分布は重なることで高い光吸収効率傾向。

} ほどよい軌道分布のDAE材料は望ましい



フォトクロミック材料の探索

- ✓ 電子吸引と電子供与部分の軌道分布は分離することで長波長傾向。
- ✓ 電子吸引と電子供与部分の軌道分布は重なることで高い光吸収効率傾向。

} ほどよい軌道分布のDAE材料は望ましい

Publishment with IBM, JSR, Sony and Keio (arXiv: 2310.04215)

長波長

A combined quantum-classical method applied to material design: optimization and discovery of photochromic materials for photopharmacology applications

Qi Gao,^{1,2,*} Michihiko Sugawara,² Paul D. Nation,³ Takao Kobayashi,^{1,2}
Yu-ya Ohnishi,^{2,4} Hiroyuki Tezuka,^{2,5} and Naoki Yamamoto^{2,†}

¹Mitsubishi Chemical Corporation, Science & Innovation Center,
1000, Kamoshida-cho, Aoba-ku, Yokohama 227-8502, Japan

²Quantum Computing Center, Keio University, Hiyoshi 3-14-1, Kohoku, Yokohama 223-8522, Japan

³IBM Quantum, Yorktown Heights, New York 10598, USA

⁴Materials Informatics Initiative, RD technology and digital transformation center,
JSR Corporation, 3-103-9, Tonomachi, Kawasaki-ku, Kawasaki, Kanagawa, 210-0821, Japan

⁵Advanced Research Laboratory, Technology Infrastructure Center, Technology Platform,
Sony Group Corporation, 1-7-1 Konan, Minato-ku, Tokyo, 108-0075, Japan

Oscillator Strength

acceptor:
電子吸引

donor:
電子供与



- ✓ Q Hubでは最先端の実機が利用でき、分野横断で専門家がおり、研究を進める環境が整っており、慶應義塾大学とIBM、参加企業の協業により、予想以上に研究を進めることができている。
- ✓ 量子化学や量子AIや最適化分野のユースケースを検証し、量子コンピュータは古典コンピュータを置き換える可能性が十分にあるテクノロジーとの認識ができた。
- ✓ NISQの実用に向けて、量子化学や量子AIや最適化分野の計算アルゴリズムにのみならずエラー緩和手法の開発も必要とされ、ここ数年は正念場。
- ✓ ユーザー企業として、世界に遅れをとってはならず、長期目線で積極的に研究を進めることが重要。