

# イオントラップ型量子コンピュータ実機上で 動かす量子化学FTQCアルゴリズム



2025.5.9 10:30 – 11:00

株式会社Quemix、東京大学 西 紘史

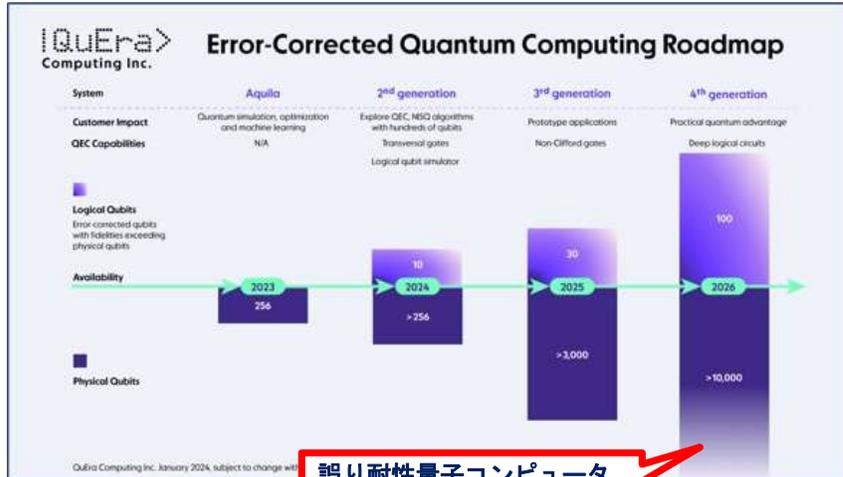
近年、誤り訂正量子コンピュータに向けた量子コンピュータ・ハードウェアの開発が活発化している

QuEra Computingが量子コンピュータ開発で近年、注目  
中性原子量子コンピューター @2023/12/7~

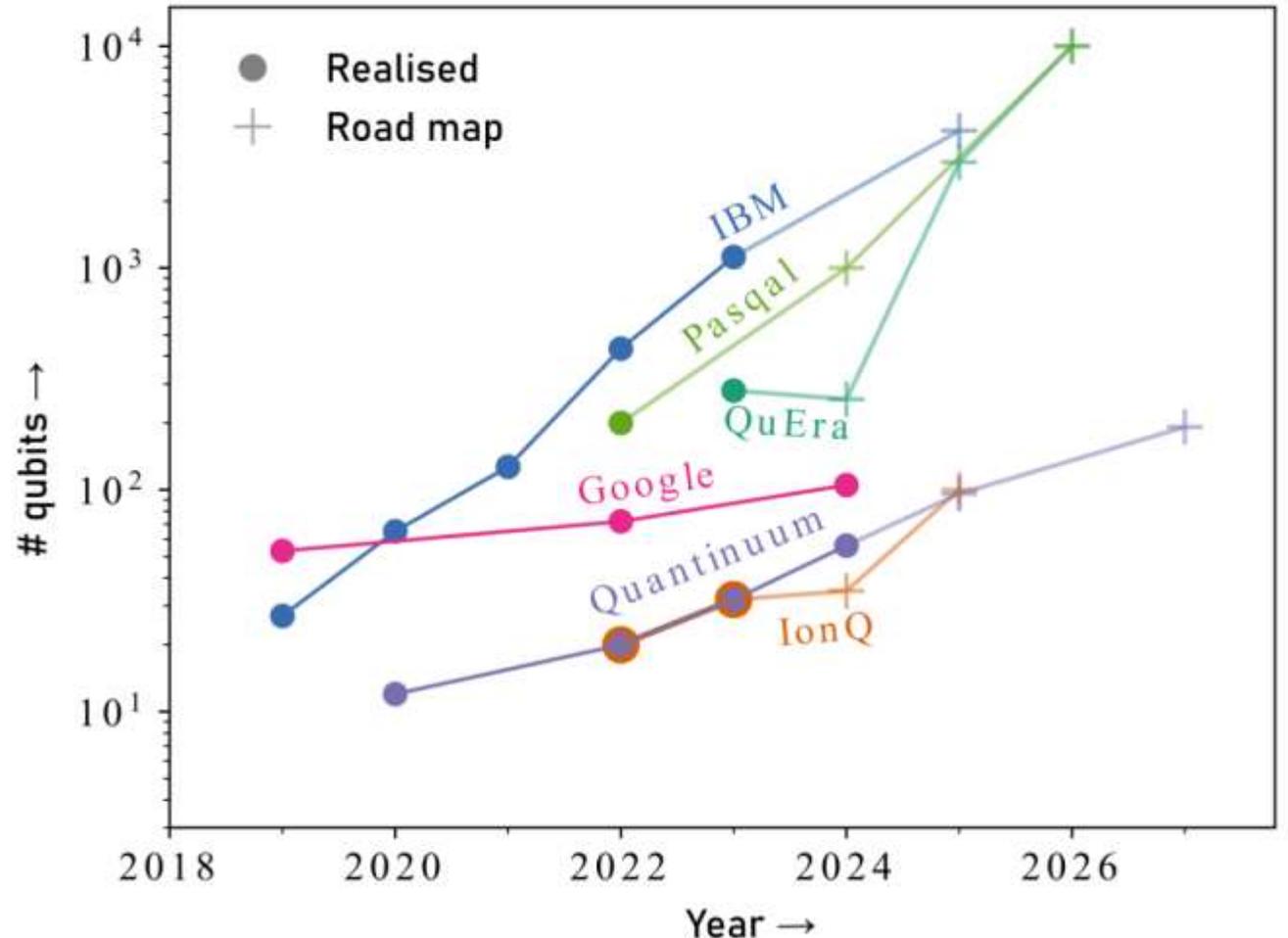
日経電子版 PRTIMES

ハーバード大学、QuEra、MIT、NIST/メリーランド大学が、48個の論理量子ビットを用いて誤り訂正量子アルゴリズムを実現し、量子コンピューティングの新時代を先導

「Nature」に掲載された新しい研究は、拡張可能で誤り耐性を備えた量子コンピューター開発における大躍進



誤り耐性量子コンピューター  
・ 2026年：100論理ビット



研究目標: スケーラブルな量子アルゴリズムの開発と少数量子ビットでの実証

~2023

~2030

~2030?

2030~

STEP1

アルゴリズム開発

STEP2

少数量子ビット実証

STEP3

大規模ビット・量子超越

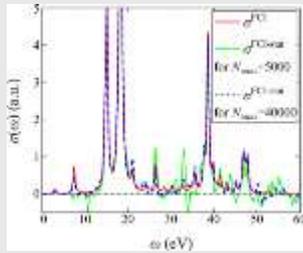
STEP4

実用化

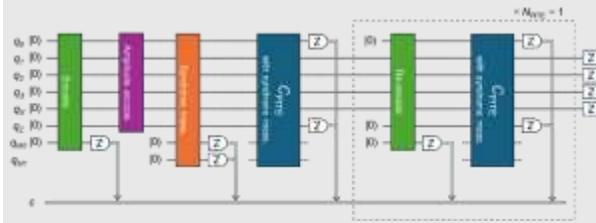
確率的虚時間発展法



X線吸収スペクトル



量子誤り検出・?



?

?

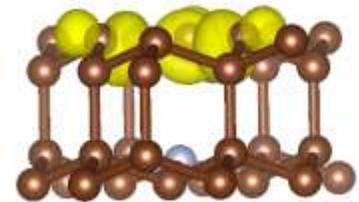
研究目的: PITE(FTQCアルゴリズム)の実機上での実行を少数量子ビットで実証

- 量子コンピュータは高精度計算に強みがある (Beyond DFT)
- 古典・量子ハイブリッドな計算フローを考案

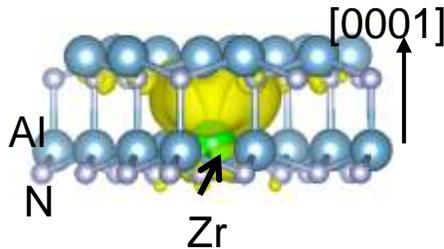
## DFT計算

原子構造をインプット

NV-center



ZrV in w-AlN



## 有効ハミルトニアン構築

低エネルギー有効ハミルトニアン

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\sigma} \sum_{ij} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\rho} \sum_{ij} \left\{ U_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{i\sigma} \right. \\ & \left. + J_{ij} \left( a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{i\rho} a_{j\sigma} + a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{j\sigma} \right) \right\} \end{aligned}$$

## 量子計算

確率的虚時間発展法 (PITE)



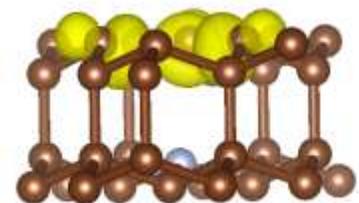
エネルギー、物性値とアウトプット

- 量子コンピュータは高精度計算に強みがある（Beyond DFT）
- 古典・量子ハイブリッドな計算フローを考案

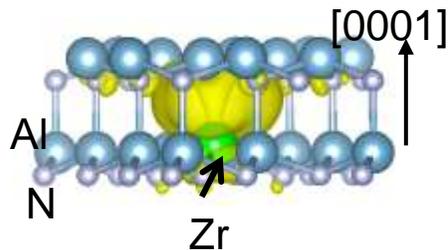
DFT計算

原子構造をインプット

NV-center



ZrV in w-AlN



有効ハミルトニアン構築

低エネルギー有効ハミルトニアン

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\sigma} \sum_{ij} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\rho} \sum_{ij} \left\{ U_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{i\sigma} \right. \\ & \left. + J_{ij} \left( a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{i\rho} a_{j\sigma} + a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{j\sigma} \right) \right\} \end{aligned}$$

量子計算

確率的虚時間発展法(PITE)

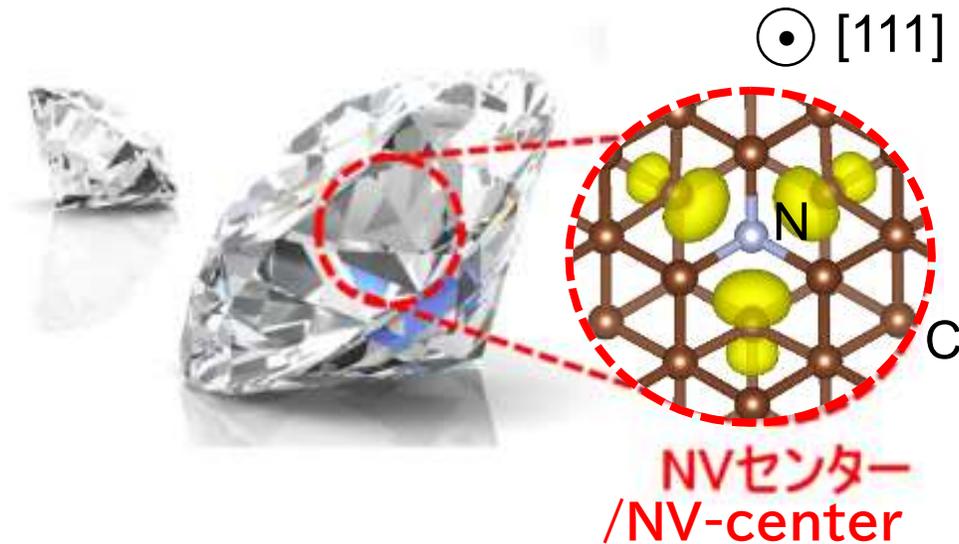


エネルギー、物性値とアウトプット

■ 本研究では、量子コンピュータを用いてスピン量子ビット(量子センシング材料)の材料計算を行う

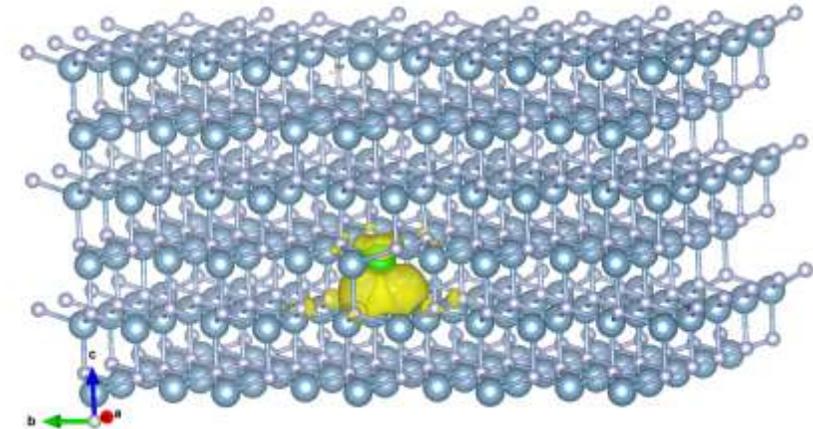
## 特徴

1. 室温・高温動作
2. 高い空間分解能
3. 広いワイドダイナミックレンジ



## AsahiKASEI

$(Zr_{Al}V_N)^0$  in w-AlN

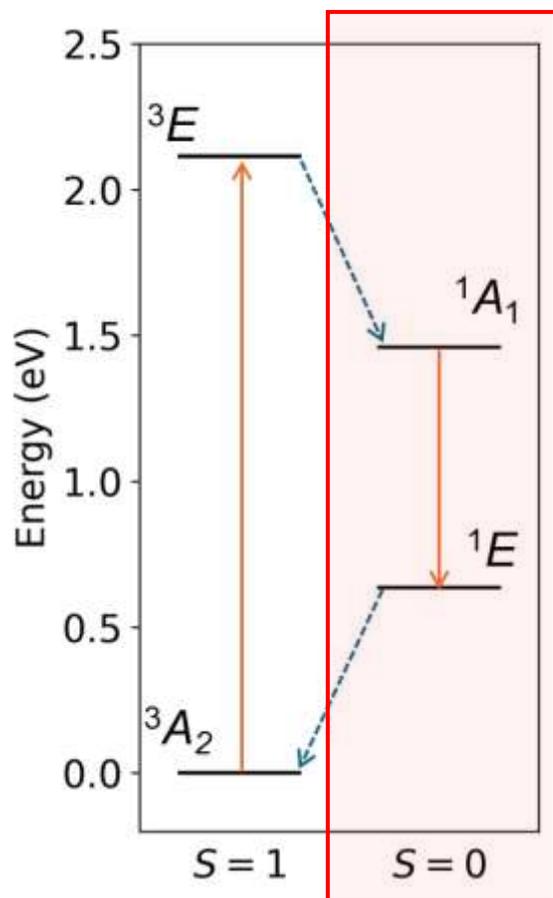


AlNはバンドギャップ6eVのウルトラ・ワイドギャップ半導体で、高品質単結晶基盤が作成可能

⇒ **スピン量子ビットの候補**

ワイドギャップ半導体中のスピン量子ビットの励起エネルギーの記述は難しい

励起エネルギー (ダイヤモンドNV)



■ 単一のスレーター行列式で表されるスピン三重項状態 ( $S=1$ )

⇒ DFTの精度 **良い**

■ 複数のスレーター行列式で表されるスピン一重項状態 ( $S=0$ )

⇒ DFTの精度 **悪化** ( $^1A_1$ と $^3E$ の順番が逆転する)

例:  $^1E$ 状態

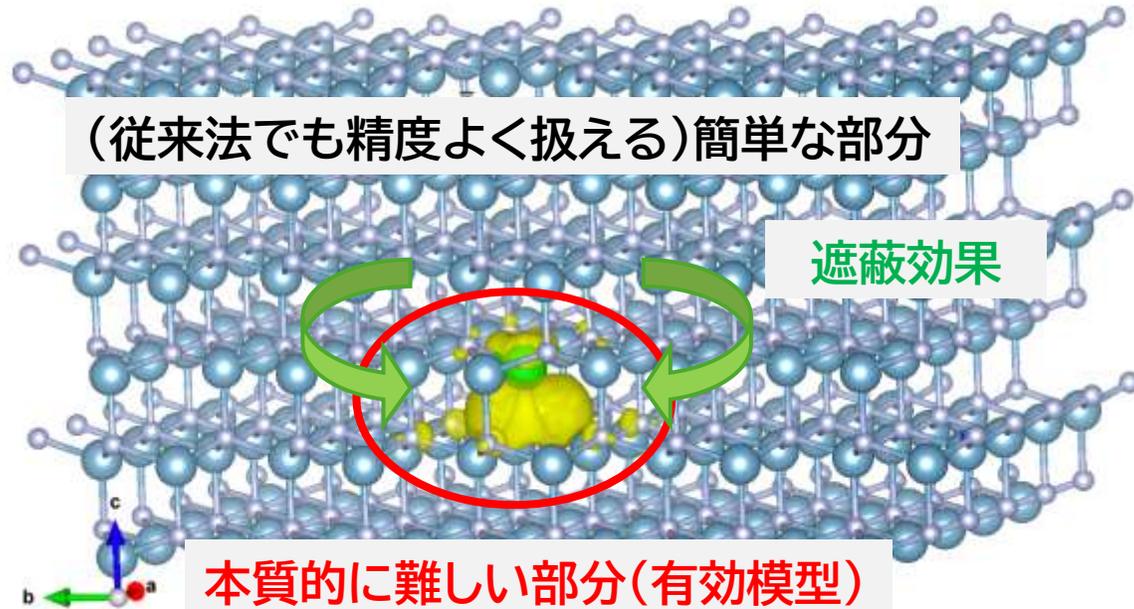
$$0.51(|e_{x\uparrow}e_{x\downarrow}a_{1\uparrow}a_{1\downarrow}\rangle - |e_{y\uparrow}e_{y\downarrow}a_{1\uparrow}a_{1\downarrow}\rangle) + 0.19(|e_{y\downarrow}e_{x\uparrow}e_{x\downarrow}a_{1\uparrow}\rangle - |e_{y\uparrow}e_{x\uparrow}e_{x\downarrow}a_{1\downarrow}\rangle) - 0.45(|e_{y\uparrow}e_{x\downarrow}a_{1\uparrow}a_{1\downarrow}\rangle - |e_{y\downarrow}e_{x\uparrow}a_{1\uparrow}a_{1\downarrow}\rangle)$$

**複数スレーター行列式を扱える高精度計算手法が必要**

**問題点:** 計算モデル(結晶中の欠陥)をそのまま扱うと計算コストが莫大

**解決策:** 計算モデルから本質的に難しい部分(有効模型)のみを切り出し、その難しい部分だけを量子計算

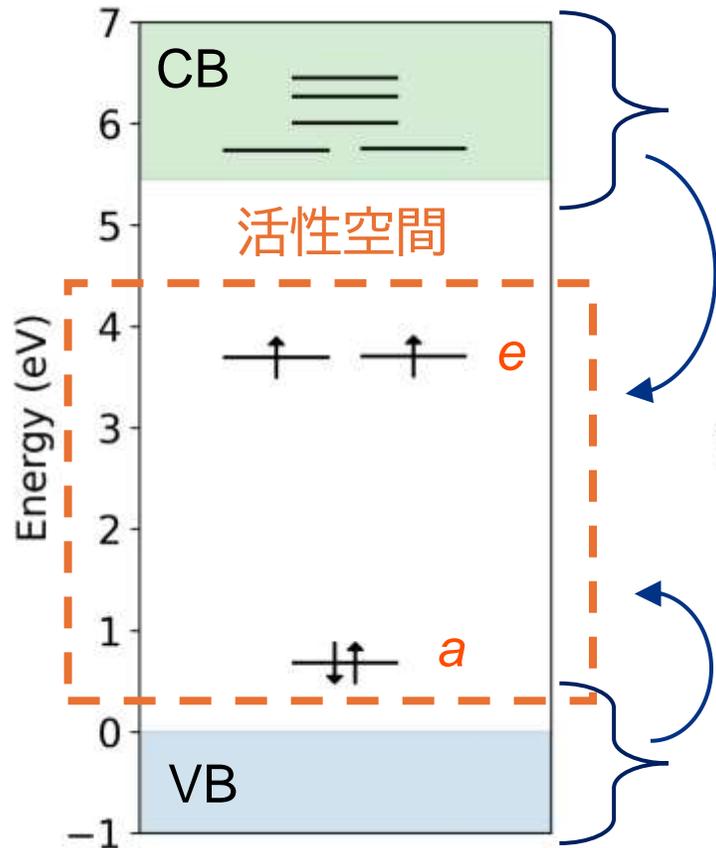
240原子のスーパーセル



結晶中でスピン量子ビット状態は孤立して存在  
⇒結晶の影響を遮蔽効果としてスピんに繰り込む

注記:正しくはエネルギー空間で定式化(次頁)

第一原理ダウンフォールディング法により、結晶中のスピン欠陥に関する有効ハミルトニアンを構築



遮蔽効果

拡張ハバード模型

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} \sum_{ij} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\rho} \sum_{ij} \left[ U_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{i\sigma} + J_{ij} \left( a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{i\rho} a_{j\sigma} + a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{j\sigma} \right) \right]$$

$U_{ij}$ と $J_{ij}$  は遮蔽された直接・交換クーロン相互作用

制限PRAの近似レベルで遮蔽効果を取り込み

KS準位 (DFTの解)

活性空間内に6軌道 ⇒ パリティ変換&Z2対称性により3量子ビット系に削減

有効ハミルトニアン構築により少数量子ビットでの計算が可能になる

Aryasetiawan, Imada et al., Phys. Rev. B **70**, 195104 (2004).

Nakamura et al., Comp. Phys. Comm. **261**, 107781 (2021).

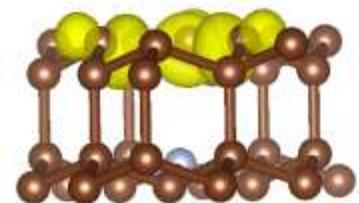
Quantum EspressoとRESPACKを使用

- 量子コンピュータは高精度計算に強みがある（Beyond DFT）
- 古典・量子ハイブリッドな計算フローを考案

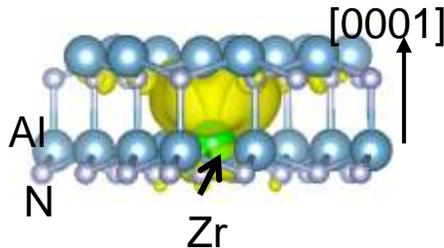
## DFT計算

原子構造をインプット

NV-center



ZrV in w-AlN



## 有効ハミルトニアン構築

低エネルギー有効ハミルトニアン

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} \sum_{ij} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\rho} \sum_{ij} \left\{ U_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{i\sigma} + J_{ij} \left( a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{i\rho} a_{j\sigma} + a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{j\sigma} \right) \right\}$$

## 量子計算

確率的虚時間発展法(PITE)



エネルギー、物性値とアウトプット

虚時間発展法  $M = e^{-H\tau}$  は高エネルギー状態を指数的に減衰させるため基底状態計算に有望と期待

$$e^{-H\tau}|\psi\rangle = c_0 e^{-E_0\tau}|\phi_0\rangle + c_1 e^{-E_1\tau}|\phi_1\rangle + \dots + c_{N-1} e^{-E_{N-1}\tau}|\phi_{N-1}\rangle$$

高エネルギー状態ほど指数関数的に減衰

$|\phi_i\rangle$ : ハミルトニアン  $H$  の固有状態

$E_i$ : ハミルトニアン  $H$  の固有エネルギー

$c_i$ : 初期状態  $|\psi\rangle$  の展開係数

$\tau$ : 虚時間

Kosugi and Nishi, Phys. Rev. Res. 4, 033121 (2022).

虚時間発展法  $M = e^{-H\tau}$  は非ユニタリー演算子

埋め込み

$$U_{\text{PITE}} \equiv \begin{pmatrix} \mathcal{M} & \sqrt{1 - \mathcal{M}^2} \\ \sqrt{1 - \mathcal{M}^2} & -\mathcal{M} \end{pmatrix}$$

PITEの作用:

$$|\psi\rangle \otimes \underbrace{|0\rangle}_{\text{補助ビット}} \longrightarrow \underbrace{\mathcal{M}|\psi\rangle \otimes |0\rangle}_{\text{成功状態}} + \underbrace{\sqrt{1 - \mathcal{M}^2}|\psi\rangle \otimes |1\rangle}_{\text{失敗状態}}$$

$U_{\text{PITE}}$ 全体としてはユニタリー演算子

確率的虚時間発展法と命名

|0>状態である補助ビットを事後選択することにより、虚時間発展演算子が作用した状態を確率的に得る

虚時間発展法  $M = e^{-H\tau}$  は非ユニタリー演算子

Kosugi and Nishi, Phys. Rev. Res. 4, 033121 (2022).

埋め込み

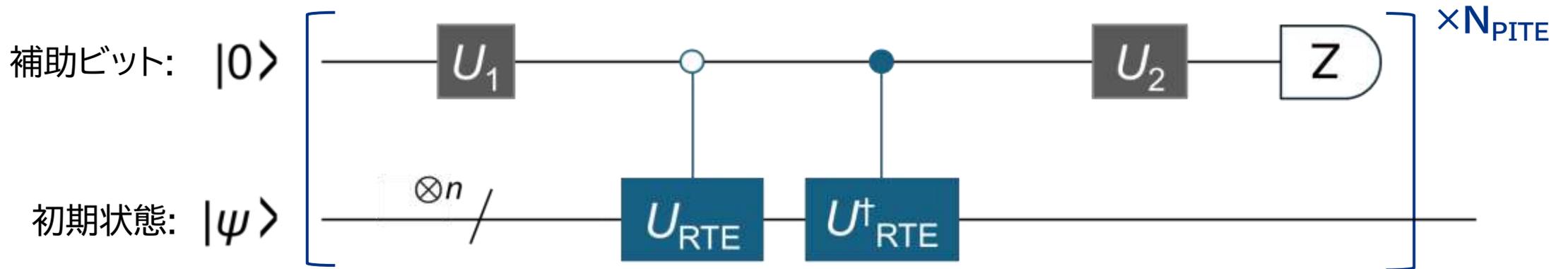
$$U_{\text{PITE}} \equiv \begin{pmatrix} M & \sqrt{1 - M^2} \\ \sqrt{1 - M^2} & -M \end{pmatrix}$$

PITEの作用:

$$|\psi\rangle \otimes |0\rangle \longrightarrow \underbrace{M|\psi\rangle \otimes |0\rangle}_{\text{成功状態}} + \underbrace{\sqrt{1 - M^2}|\psi\rangle \otimes |1\rangle}_{\text{失敗状態}}$$

補助ビット

$U_{\text{PITE}}$ はユニタリー演算子だが、1Q/2Qゲートに分解することが必要 → 微小虚時間 $\Delta\tau$ の1次に関する近似回路



多項式時間の実時間発展演算子  $U_{\text{RTE}}$  を用いて虚時間発展演算子を実装可能

$$|\psi\rangle \otimes |0\rangle \longrightarrow \underbrace{\mathcal{M}|\psi\rangle \otimes |0\rangle}_{\text{成功状態}} + \underbrace{\sqrt{1 - \mathcal{M}^2}|\psi\rangle \otimes |1\rangle}_{\text{失敗状態}}$$

補助ビット
成功状態
失敗状態

Nishi et al., Phys. Rev. Res. 5, 043048 (2023).  
 Nishi et al., Phys. Rev. Res. 6, L022041 (2024).

$$K = O\left(\ln\left(\frac{(1 - \delta)(1 - |c_1|^2)}{\delta|c_1|^2}\right)\right)$$

PITEの計算コスト:

$$(d_{\text{CRTE}}: 1\text{ステップの回路深さ}) \times (K: \text{ステップ数}) \div (P_K: \text{全成功確率})$$

成功確率 (補助ビットに対する射影測定  $\hat{P}_0 = I \otimes |0\rangle\langle 0|$  の観測確率)

$$P_{\text{succ}} = \|\mathcal{M}|\psi\rangle\|^2 = \mathcal{M}^2(E_0)|c_0|^2 + \underbrace{\mathcal{M}^2(E_1)|c_1|^2 + \dots + \mathcal{M}^2(E_{N-1})|c_{N-1}|^2}_{\text{基底状態取得のための条件}} \rightarrow \mathcal{M}^2(E_0)|c_0|^2$$

基底状態を取得したいので、これらが零になるように非ユニタリ演算子  $\mathcal{M}$  が設計される

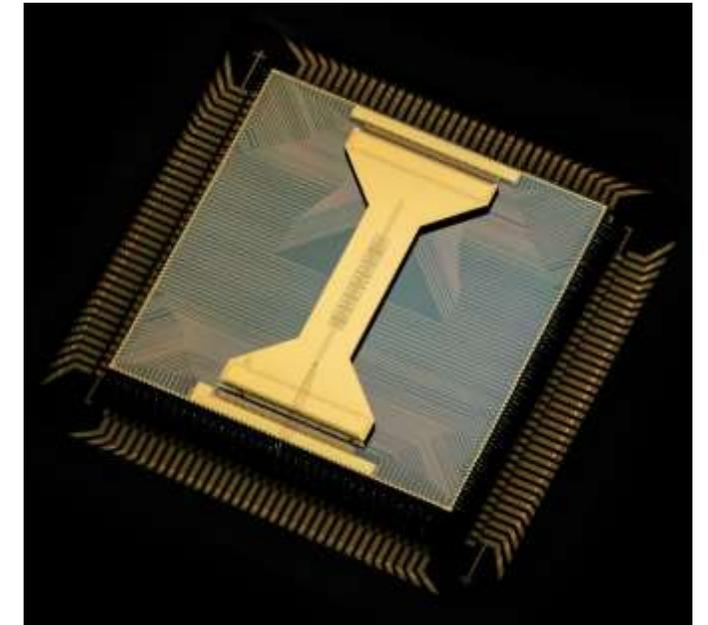
(PITE:  $\mathcal{M} \approx e^{-\tau E_i}$ 、QPE:  $\mathcal{M} \approx \delta(E_i)$ 、QETU (ステップ関数):  $\mathcal{M} \approx H(E_i)$ )

解析的評価: 最良の場合は指数加速、ワーストケースの場合は振幅増幅を併用することで2乗加速を達成

ワーストケース: 一様重ね合わせ状態 ( $|c_0|^2 = 1/N$ )

## 捕捉イオン型Quantinuum H1-1量子計算機の特徴

- 99.9%の高い二量子ゲート忠実度
- 全結合
- 回路中間測定と再利用



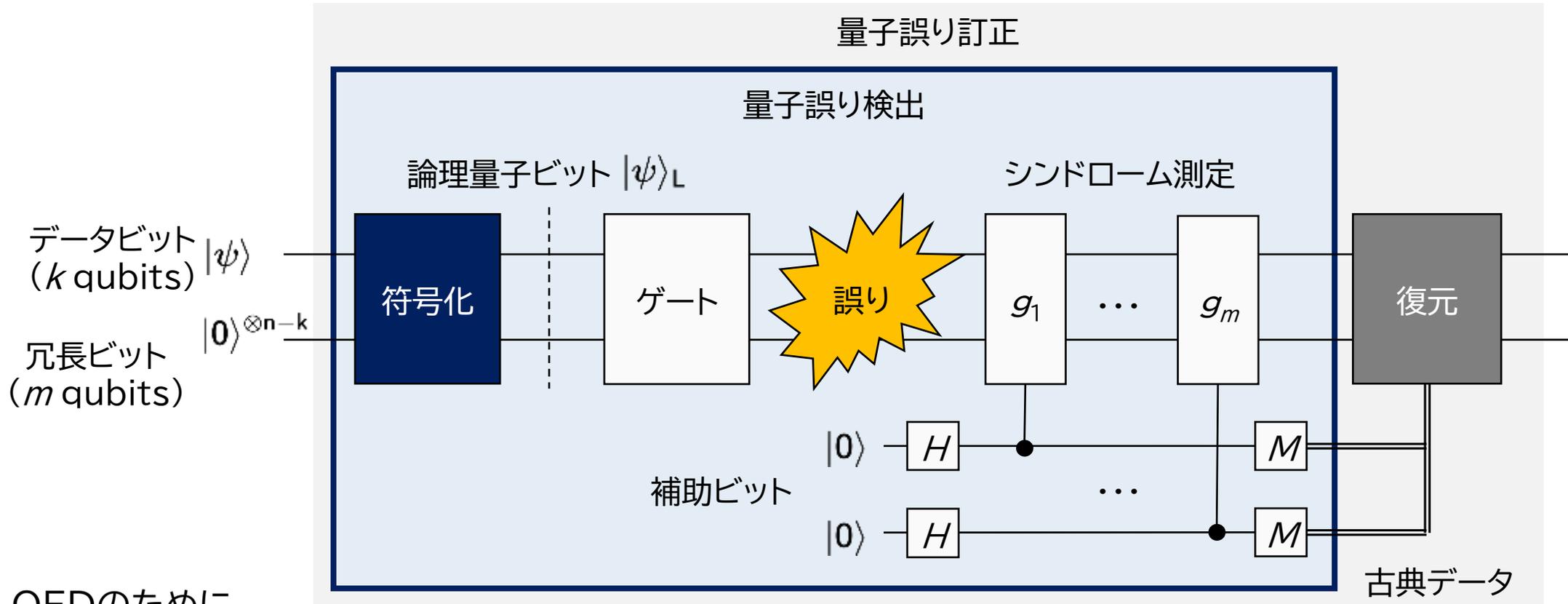
量子ビット数	20
量子体積	$2^{20}$
単一量子ゲート忠実度	99.9979(3) %
二量子ゲート忠実度	99.914(3) %

<https://www.quantinuum.com/hardware/h1>

高い忠実度だが、FTQCアルゴリズムの実行には更なる誤りの低減が必須

FTQC時代に向けた第一歩として、量子ビット数のオーバーヘッドの少ないQEDをPITEに実装

誤りの発生有無を検出すればよい。誤りの発生場所まで特定できると、誤り訂正が可能。



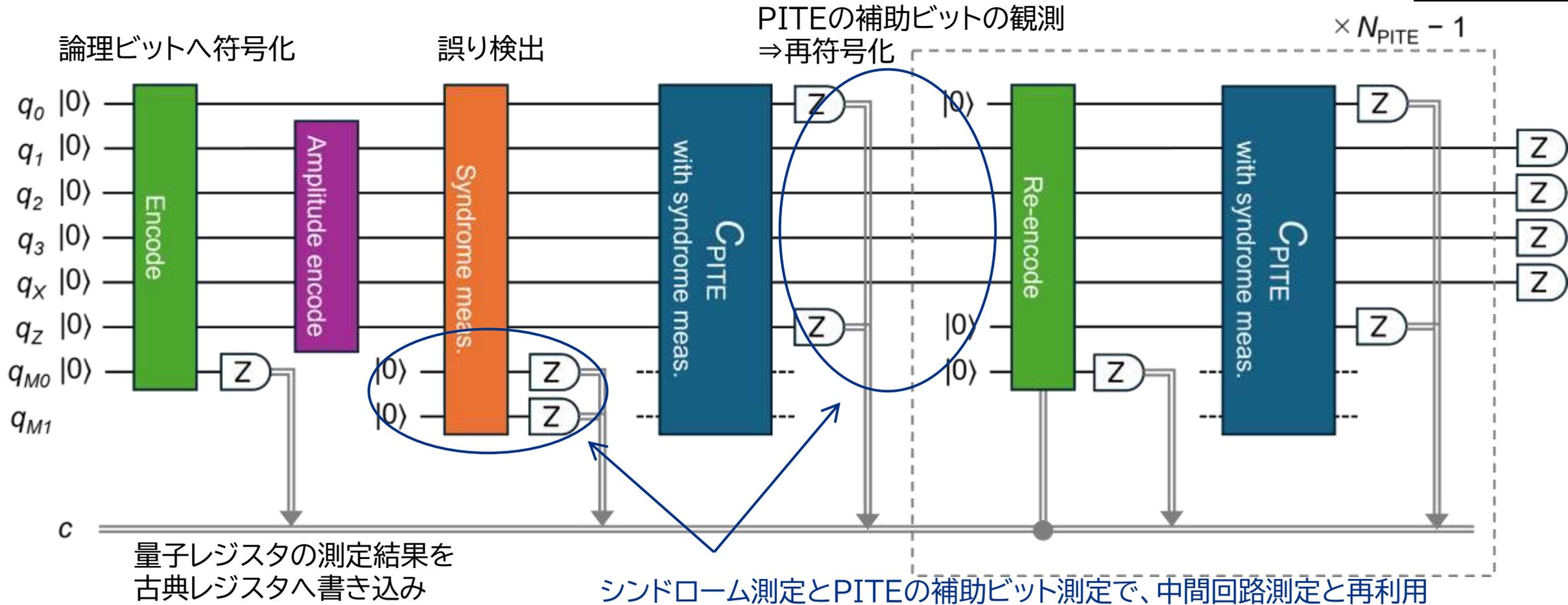
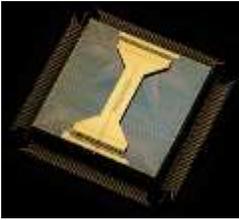
QEDのために

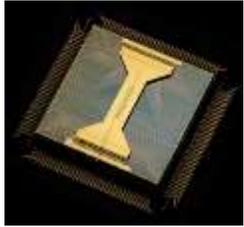
補助ビット数4つ使用

Self, Benedetti, and Amaro, Nat. Phys. 20, 219 (2024).

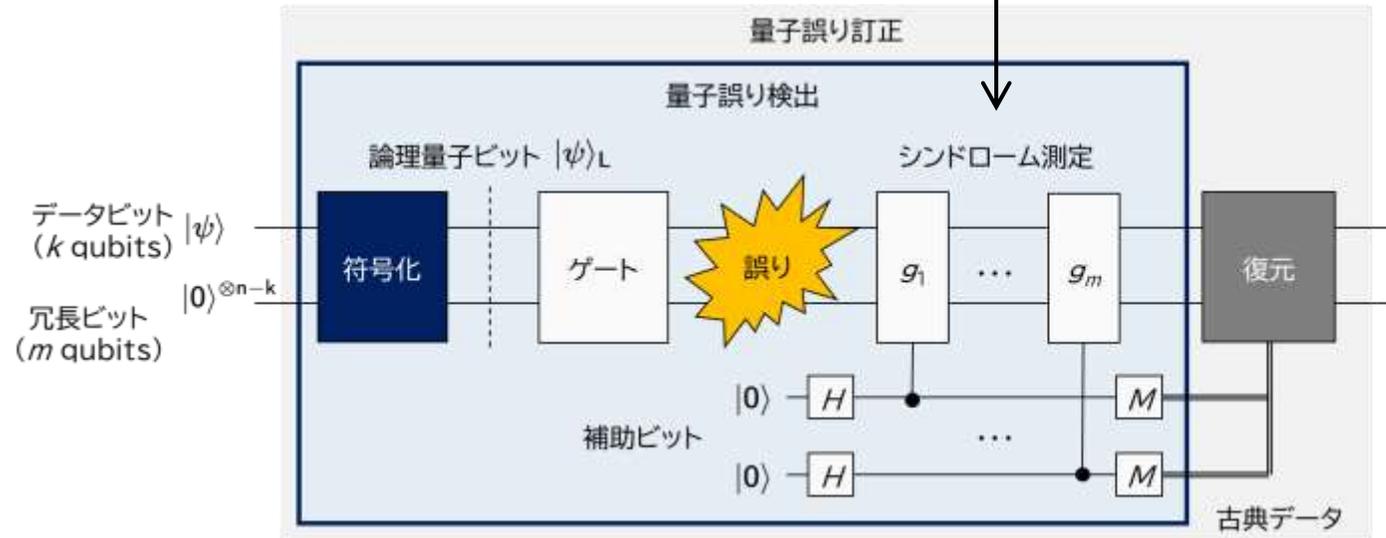
# 計算手法 —QEDにより符号化されたPITEの量子回路—

- 3Q(ハミルトニアン)+1Q(PITE)+4Q(QED) : 合計 8量子ビット使用
- 誤りが検出されたら、その計算結果は廃棄

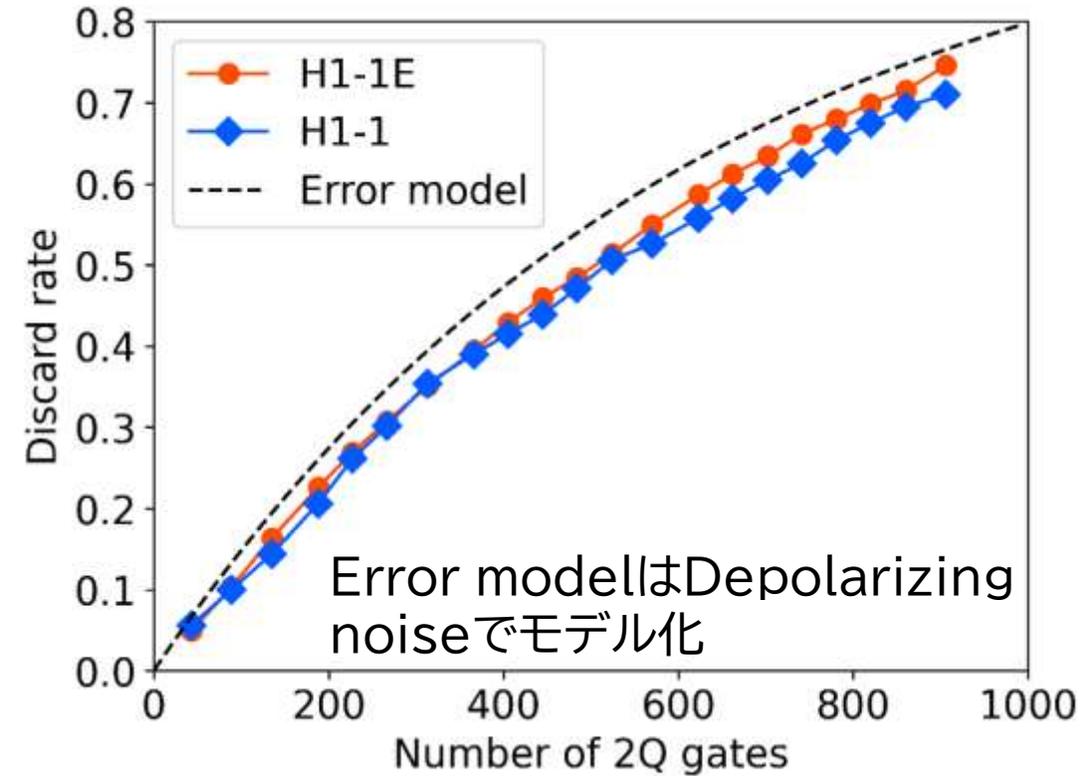




回路全体で21回の誤り検出を実施  
(約40回の2Qゲートに1回の割合)



H1-1Eはエミュレータ(古典計算)  
H1-1は量子コンピュータ実機(補足イオン型)

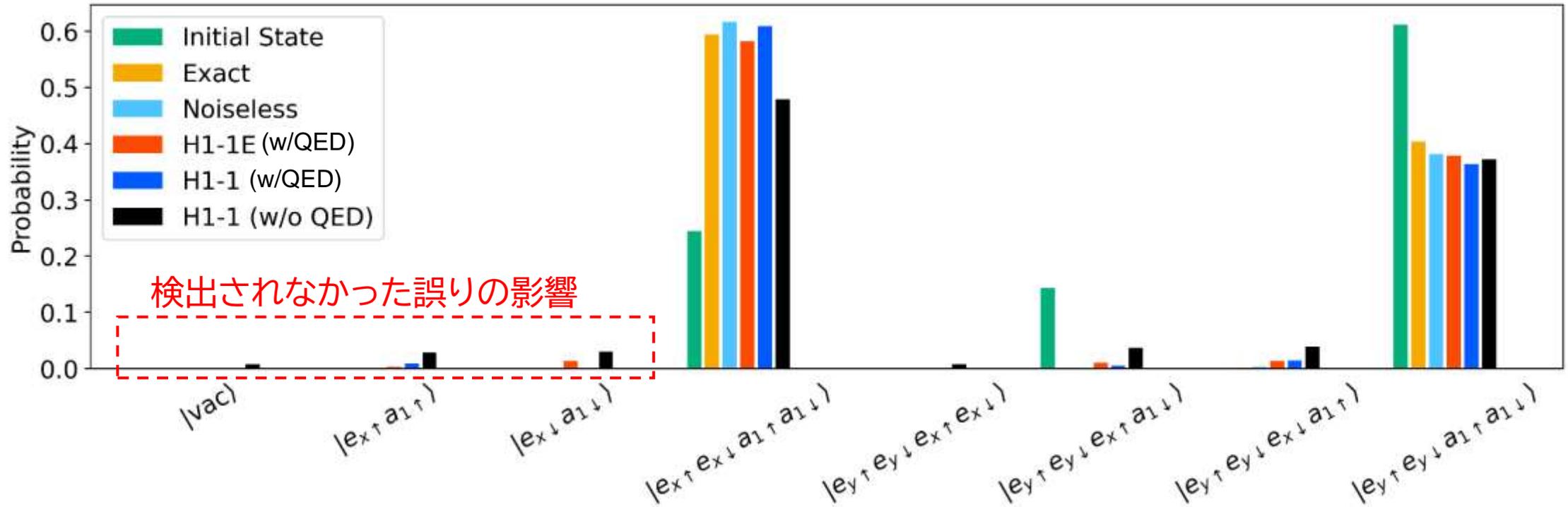


- 約960回の2Qゲートにおいて76%の割合で誤りが検出された
- 誤りが検出されなかった結果は、理想的な結果と近いことが期待される

$$F(|\Psi^{\text{FCI}}\rangle, |\Psi\rangle) := \left( \sum_i |c_i^{\text{FCI}}| |c_i^\beta| \right)^2$$

	古典忠実度
H1-1E (QED)	0.97
H1-1 (QED)	0.98
H1-1 (w/o QED)	0.87

H1-1Eはエミュレータ(古典計算)  
H1-1は量子コンピュータ実機(補足イオン型)

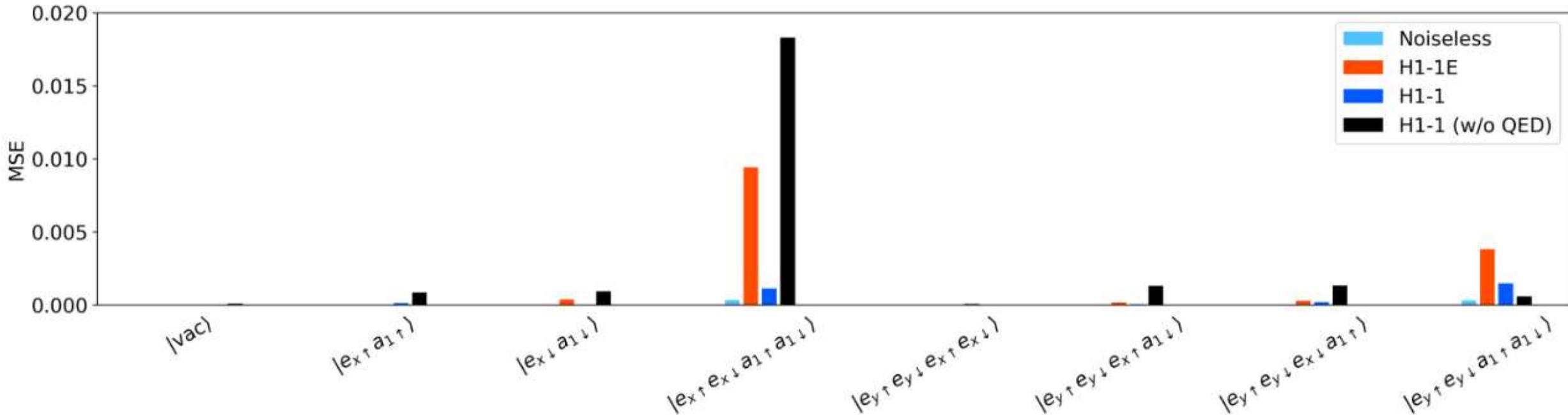


- 98%の古典忠実度で基底状態を計算することができた

量子誤り検出によって、誤りのある結果は廃棄する ⇒ 測定回数が少なくなり、分散が大きくなるのではないか？

(今回の結果はたまたま良かっただけではないか？)

$$\text{MSE}[\bar{O}_\rho] = \underbrace{\text{Tr}[O\rho] - \text{Tr}[O\rho_0]}_{\text{QEDによる誤りの減少}} + \underbrace{\frac{\text{Tr}[O^2\rho] - \text{Tr}[O\rho]^2}{N_{\text{cir}}}}_{\text{QEDによる分散の増大}}$$



量子誤り検出を行ったことにより、全体的にMSEを小さくできていることを確認

- 結晶中の欠陥に対する低エネルギー有効ハミルトニアンを構築
  - w-AlN中の複合欠陥とNV中心ダイヤモンドに適用
- FTQC時代への第一歩として、PITEに量子誤り検出を実装&捕捉イオン量子コンピュータ上で実行
- 古典フィデリティ98%の精度でスピンシングレット状態の基底・励起状態と取得

H. Nishi, Y. Takei, T. Kosugi, S. Mieda, Y. Natsume, T. Aoyagi, and Y. Matsushita, *Physical Review Applied* 23, 034016 (2025).

共同研究(旭化成さま)

武井祐樹さま  
三枝俊亮さま  
夏目穰さま  
青柳岳司さま



量子計算機の計算リソース

三井物産さま



クオンティニウムさま



共同研究 & ご議論 (Quemixのメンバー)

小杉太一さん  
松下雄一郎さん



古典計算機の計算リソース

東大物性研スパコン



量子のチカラで、ともに未来を創ろう。

---

