

量子技術の実用化推進ワーキンググループ(第四回) 2022.12.8

量子コンピューティングへの取組みと今後の課題

三菱ケミカル株式会社

Science & Innovation Center Materials Design Laboratory

量子コンピューティングに関する活動概要

デジタルイノベーションをもたらすことが期待される最先端技術として量子コンピューティングの
応用研究およびユースケース検討を展開

COI-NEXT

量子サステナブルAI拠点
(2022～2031)

- 東大／慶應大／理研／OISTと広く連携しアルゴリズム面を中心としたコラボレーションを計画

KEIO Q-Hub / QII (2018～2024)

- 慶應大／東大／IBM／参画企業によるオープンコラボレーション
- 実機を活用しなければ実現できない量子コンピュータの応用研究を実施

Q-STAR (2022～)

- 2021年任意団体設立メンバーとして参画
- 各部会におけるユースケース検討を中心として活動

KEIO Q-Hubにおける取組み紹介

2018年から慶應Q Hubに参画し、産学連携の研究を継続中



シミュレーション

- 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) 光吸収スペクトル：
色素材料

量子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

材料探索

- 1) 同位体発光材料：
生体診断用途



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}



pubs.acs.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 F. Rice, Stephen P. Wood,
1 www.nature.com/scientificreports

scientific reports

OPEN Natural quantum reservoir computing for temporal information processing

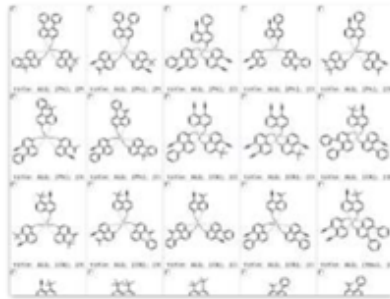
Yudai Suzuki^{1,2,3}, Qi Gao^{2,3}, Ken C. Pradel², Kenji Yasuoka² & Naoki Yamamoto^{3,4}

化学・素材産業における量子コンピュータへの期待

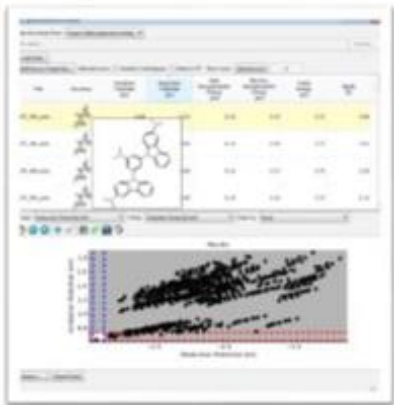
- ✓ 現実と合致するシミュレーション、計算可能な対象の拡大
- ✓ 現状では不可能なAI予測、最適化問題の実施

新規材料開発に必要な期間
とコスト低減の実現

シミュレーション



材料探索



マテリアルズ・ インフォマティクス

AI予測



- 二酸化炭素分離回収のための分離膜材料設計
- グリーン水素、アンモニア製造触媒の設計
- プラリサイクルにおける熱分解のための触媒設計
- 次世代高性能電池向け材料の設計
- 次世代通信向け材料の設計
- 創薬のための新規化合物探索

量子未来社会ビジョンの実現

【未来社会像（ビジョン）】

経済成長 ~Innovation~

次世代高速コンピューティングが仮説と検証のイノベーション創出サイクルを飛躍的に加速するなど、生産性革命など産業の成長機会創出等の経済成長を実現



人と環境の調和 ~Sustainability~

次世代環境材料の開発やエネルギーベストミックス等によるカーボンニュートラルやサーキュラーエコノミーの実現など人と環境が調和し、持続的に発展する社会を実現



心豊かな暮らし ~Well-being~

量子暗号通信による安全・安心な暮らし、次世代診断による健康・長寿、災害予測や避難誘導システムによるレジリエントな社会など、人々の心豊かな暮らしを実現

