

新素材の研究開発を加速させる 量子コンピュータ技術への可能性

The promise for quantum computer technology to accelerate research and development of new materials



旭化成株式会社 インフォマティクス推進センター センター長 青柳 岳司
株式会社Quemix 研究開発部 部長 西 紘史



西 紘史

Hirofumi Nishi

株式会社Quemix 研究開発部 部長

Quemix Inc. Director, Research & Development

東京大学 理学系研究科 特任研究員

Project researcher, Department of physics, The university of Tokyo



Quemixは量子ソフトウェアテクノロジーのスタートアップ企業です。
私たちは、量子技術のエキスパートであり続け、時代をリードする企業の
ブレークスルーを実現し、人類が夢見た未来を実現します。

Quemix is a quantum software technology startup. We remain experts in quantum
technology, achieve breakthroughs leading the era, and realize the future humanity
has dreamed of.

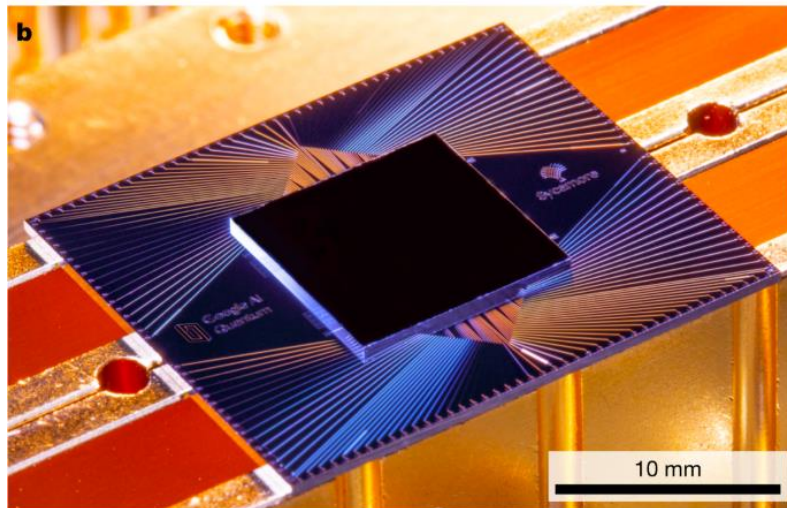


雑音あり中規模量子デバイス(NISQ)時代・・・量子計算結果は古典的にシミュレーションするのが困難

Noisy intermediate scale quantum (NISQ) era・・・Quantum simulation results are classically hard to simulate

Google's 54 qubits processor

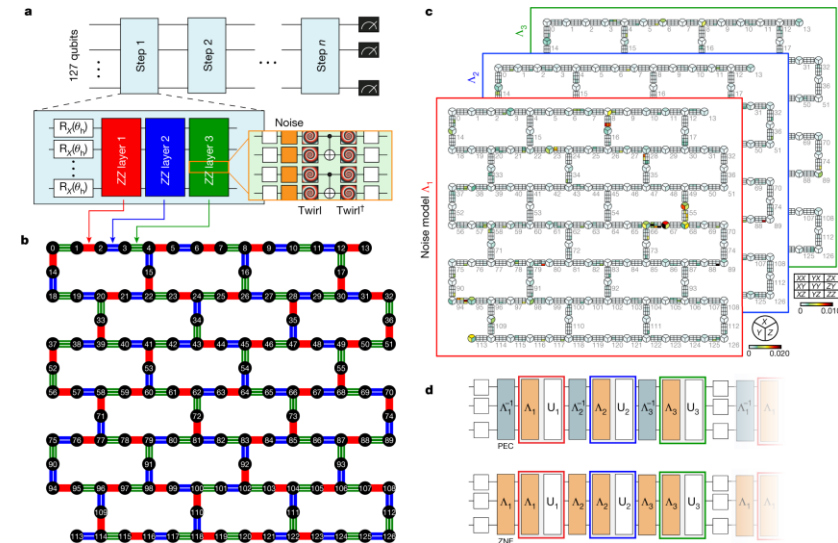
Task: sampling



Arute et al., Nature 574, 505 (2019).

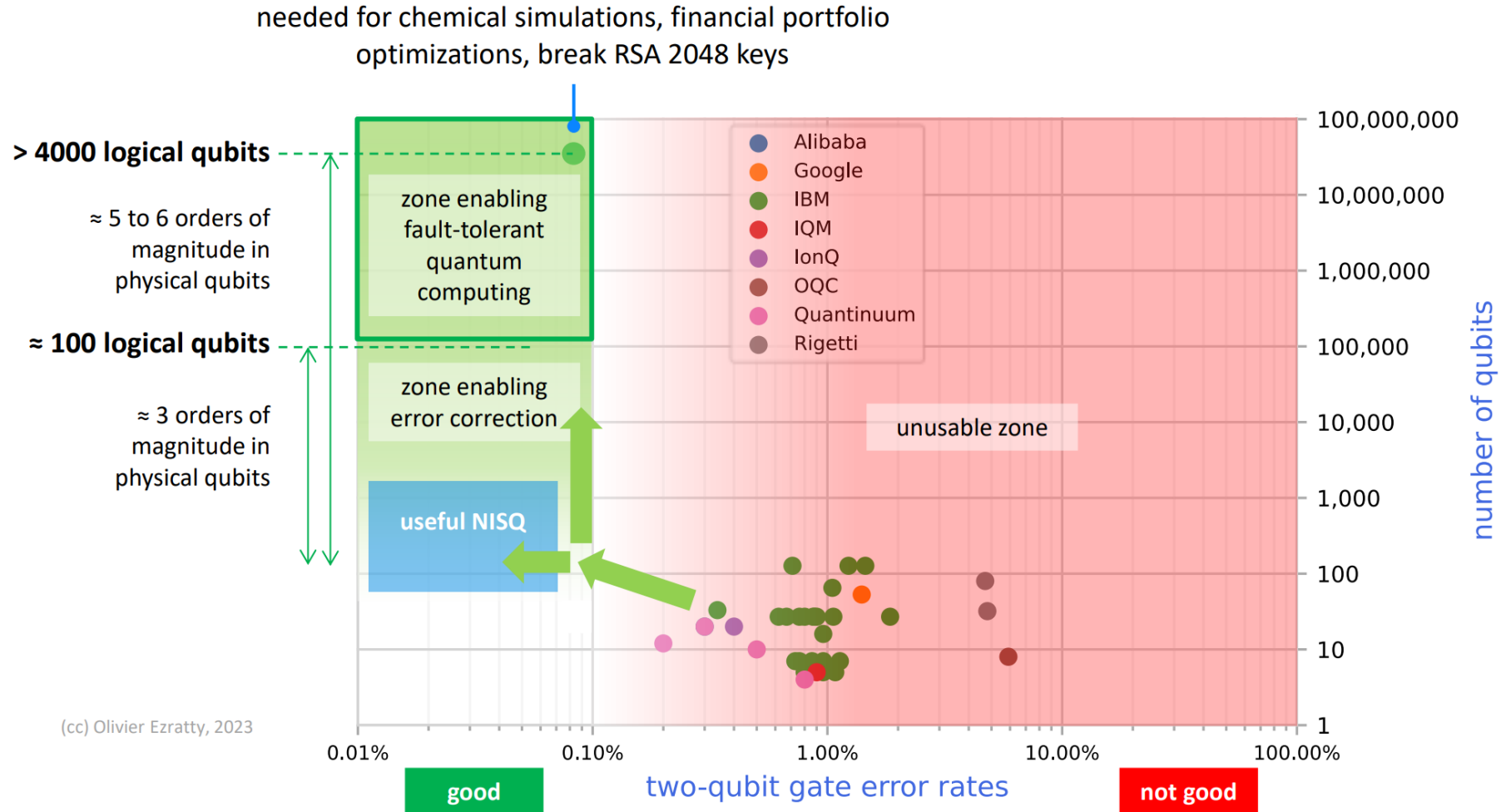
IBM's 127 qubits processor

Task: Ising Hamiltonian simulation



Kim et al., Nature 618, 500 (2023).

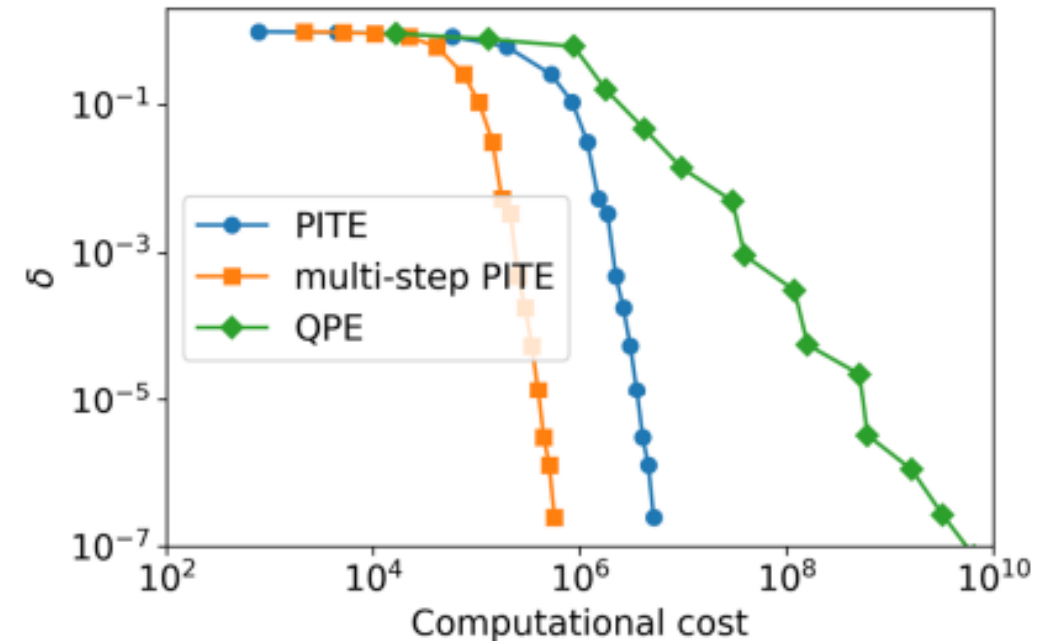
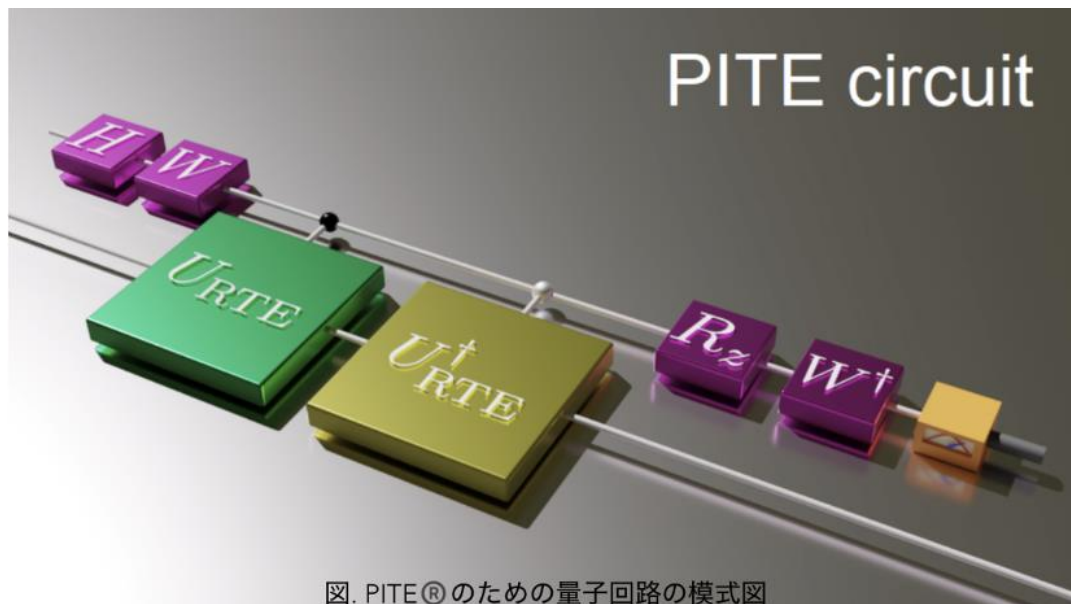
ハードウェアは有用なNISQ、早期FTQC、FTQCに向けて着実に進展している
 HW is advancing step by step for useful NISQ, early FTQC, and FTQC.



(cc) Olivier Ezratty, 2023

PITEは、FTQC時代の向けて設計された、多体ハミルトニアンソルバーである
PITEは、古典計算機による最適化と、最適化のための多数の観測が不要な非変分的な方法
計算量の解析から量子加速することを確認

PITE is a solver for many-body Hamiltonian, designed toward FTQC era.
PITE is a non-variational method that does not require classical optimization.
Confirmed that the quantum acceleration occurs from resource analysis.

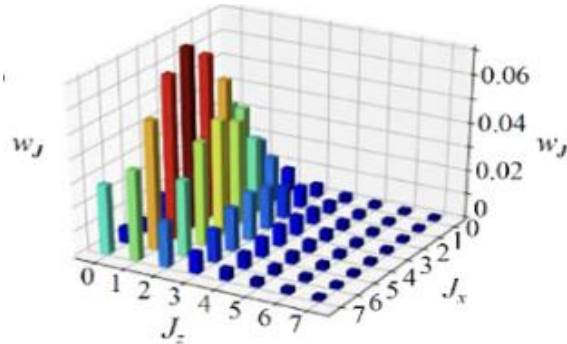
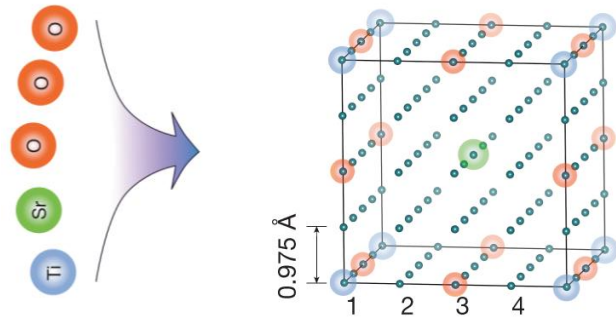


Kosugi, Nishiya, Nishi and Matsushita, Phys. Rev. Res. 4, 033121 (2022).

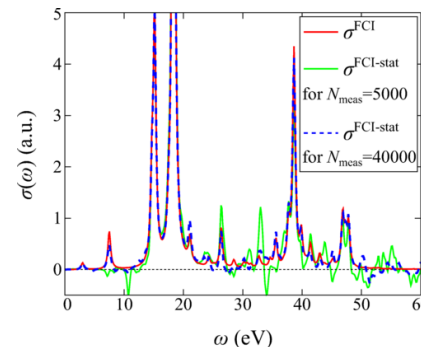
Nishi, Kosugi, Nishiya, and Matsushita, Phys. Rev Res. 6, L022041 (2024).

Material science/材料科学

- Crystal structure prediction/結晶構造予測
Kosugi et al., npj Quantum Information **9**, 112 (2023).

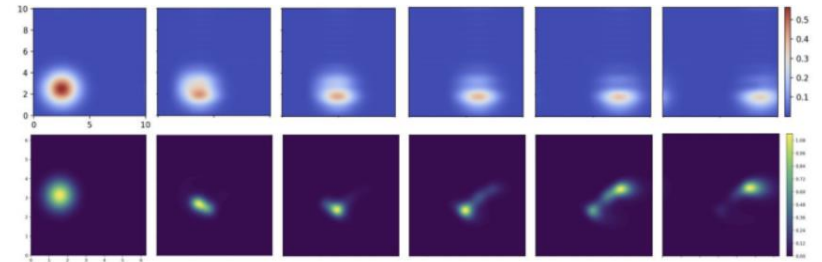


- Linear response function
/線形応答関数
Kosugi et al., PRA **101**, 012330 (2020).
Kosugi et al., PRR **2**, 033043 (2020).
- Electrons under magnetic field
/磁場中の電子
Kosugi et al., JJAP **62**, 062004 (2023).



CAE

- Advection diffusion eq.
/移流拡散方程式



Central absorption (upper)
/中心部吸収(上)
Local creation & absorption
(lower)/ 局所生成・吸収(下)

In preparation/鋭意製作中



AsahiKASEI

青柳 岳司

Takeshi Aoyagi

旭化成株式会社

Asahi Kasei Corp.

インフォマティクス推進センター センター長

Informatics Promotion Center, Director

社名 / Trade name

旭化成株式会社
Asahi Kasei Corp.

本社 / Head office

東京都千代田区
Tokyo, Japan

創業 / Founding

1922年

2023年度業績(連結)

Fiscal 2023 results (consolidated)*

売上高 2兆7,849億円
Net sales ¥2,784.9 billion

営業利益 1,407億円
Operating income ¥140.7 billion

社長 / President

工藤 幸四郎
Koshiro Kudo

資本金 / Paid-in capital*

1,034億円
¥103.4 billion

従業員(連結) Employees (consolidated)*

49,295人

• 2024年3月末時点
As of March 31, 2024



東京本社(日比谷)
Head Office

旭化成グループは、事業持株会社である旭化成と、7つの事業会社を中核に、「マテリアル」「住宅」「ヘルスケア」の3領域で事業を展開している総合化学メーカーです。

Centered on the operating holding company Asahi Kasei Corp. and seven core operating companies, the Asahi Kasei Group is a diversified global manufacturer with three business sectors of Material, Homes, and Health Care



マテリアル事業 主要製品例 / Examples of Main Products

アクリロニトリル
Acrylonitrile



FH2R アルカリ水電解槽
Alkaline water electrolysis
system at FH2R



サランラップ®
Saran Wrap®



ハイポア™・セルガード®
Hipore™ and Celgard™



人工皮革Dinamica®
Dinamica™ artificial suede



オーディオ・ボイス向けLSI
LSIs for audio & voice



最近のR&Dトピックス1 / Recent R&D Topics1

プレスリリース

リチウムイオン電池用超イオン伝導性電解液のPoCに成功、実用化に前進

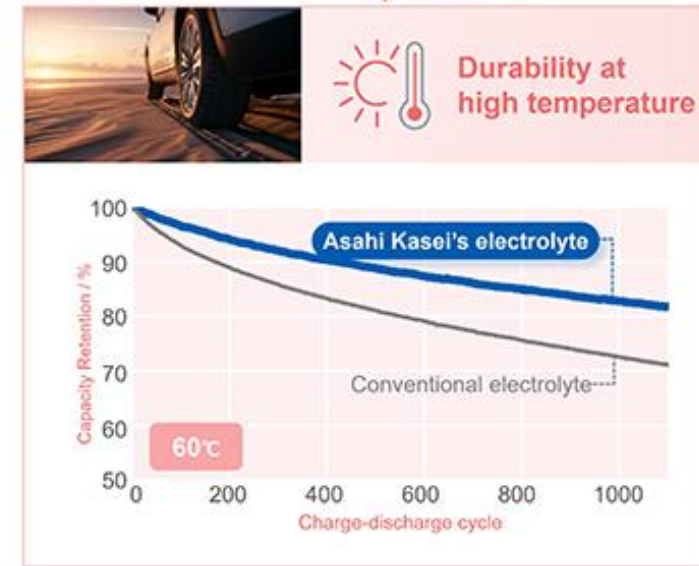
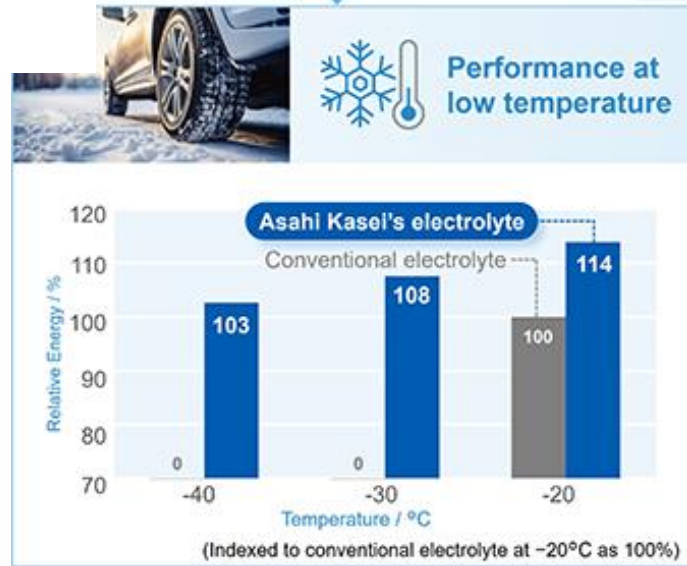
低温下での出力向上と、高温下での耐久性向上の両立を可能に

LFP cylindrical cells were used for POC



-40°C

60°C



Press Releases

Asahi Kasei achieves technological breakthrough with innovative electrolyte

Proof of concept for lithium-ion batteries with improved power output and service life

<https://www.asahi-kasei.com/jp/news/2024/ze240607.html>

最近のR&Dトピックス2／Recent R&D Topics2

プレスリリース

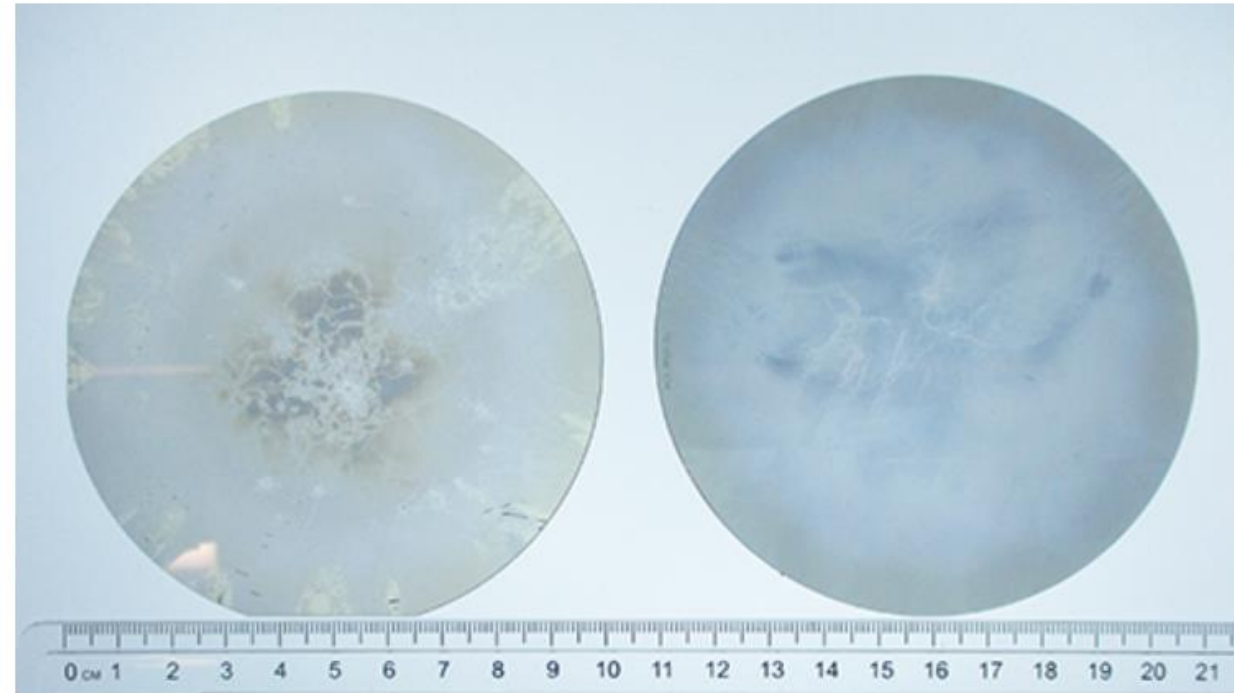
4インチ窒化アルミニウム(AIN)単結晶基板のサンプル提供を2024年度下期より開始

次世代パワーデバイス・高周波デバイスへの応用検討を加速

Press Releases

Crystal IS and Asahi Kasei have achieved 99% usable area on 100 mm bulk aluminum nitride substrate

Following the first reported 100 mm diameter AlN in 2023, the company now announces improved wafer quality based on specification for UVC LEDs



過去に製造した使用可能面積90%のAlN基板(左)と今回製造に成功した同99.3%の基板(右)

Comparison of Crystal IS 100 mm bulk aluminum nitride substrate from CY24 Q1 (left) with 90% usable area and CY24 Q2 (right) with 99.3% usable area.

サイバー材料設計を目指した取り組みの例

Examples of the study for cyber space material design

- 材料データベースの拡充

Materials database

- ハイスループットシミュレーション

High-throughput simulation

- 高度MIツール

Advanced MI tools

- 高分子物性自動計算システム

Automated calculation of polymer properties



- ニューラルネットワークポテンシャル

Neural network potential



- 高分子インフォマティクスプラットフォーム

Polymer informatics product



- 量子コンピューター技術調査 Quantum Computer Technology Survey

- 組み合わせ最適化 Combination Quantum Optimization

- 量子機械学習 Machine learning

- 量子化学 Quantum Chemistry



量子機械学習の取り組み事例

Example of the study for Quantum Machine Learning('22/11/8)

www.nature.com/scientificreports

scientific reports

Check for updates

OPEN

Noise-robust optimization of quantum machine learning models for polymer properties using a simulator and validated on the IonQ quantum computer

Yuki Ishiyama^{1,2✉}, Ryutaro Nagai³, Shunsuke Mieda^{1,2}, Yuki Takei^{1,2}, Yuichiro Minato³ & Yutaka Natsume^{1,4}

Quantum machine learning for predicting the physical properties of polymer materials based on the molecular descriptors of monomers was investigated. Under the stochastic variation of the expected predicted values obtained from quantum circuits due to finite sampling, the methods proposed in previous works did not make sufficient progress in optimizing the parameters. To enable parameter optimization despite the presence of stochastic variations in the expected values, quantum circuits that improve prediction accuracy without increasing the number of parameters and parameter optimization methods that are robust to stochastic variations in the expected predicted values, were investigated. The multi-scale entanglement renormalization ansatz circuit improved the prediction accuracy without increasing the number of parameters. The stochastic gradient descent method using the parameter-shift rule for gradient calculation was shown to be robust to sampling variability in the expected value. Finally, the quantum machine learning model was trained on an actual ion-trap quantum computer. At each optimization step, the coefficient of determination R^2 improved equally on the actual machine and simulator, indicating that our findings enable the training of quantum circuits on the actual quantum computer to the same extent as on the simulator.

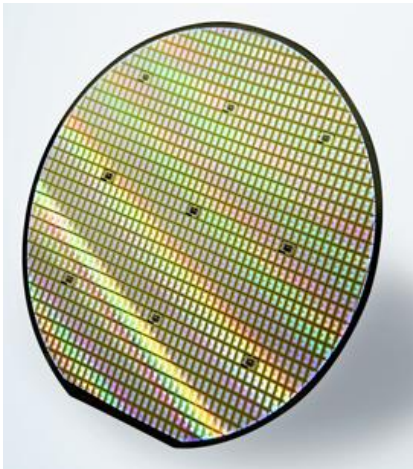
Joint research with Asahi-Kasei

研究テーマ報告

- 低エネルギー消費のためのパワーデバイス Power devices for low power consumption RF
- 5G・6G世代に向けた高周波デバイス Devices for 5G/6G technologies
- 消毒用のUV・UV-C LED (例: コロナウイルス) UV/UV-C LED for disinfection (e.g. COVID-19)

Silicon Carbide

$$E_g = 3.3 \text{ eV}$$



<https://www.rohm.co.jp/news-detail?news-title=2020-06-17-news-4gsic&defaultGroupId=false>

Aluminum Nitride

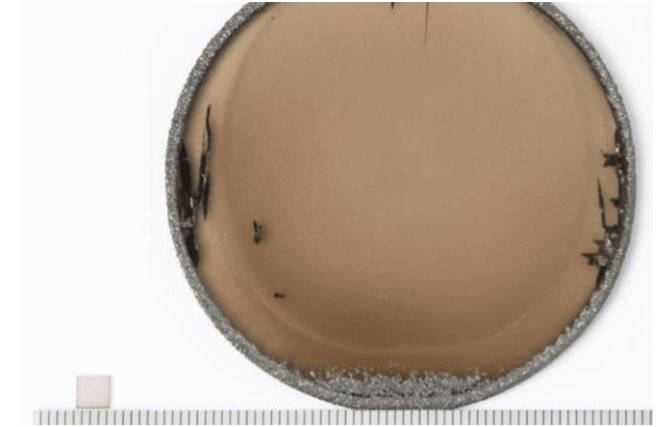
$$E_g = 6.0 \text{ eV}$$



<https://www.asahi-kasei.com/news/2022/e221005.html>

Diamond

$$E_g = 5.5 \text{ eV}$$



<https://newatlas.com/electronics/2-inch-diamond-wafers-quantum-memory-billion-blurays/>

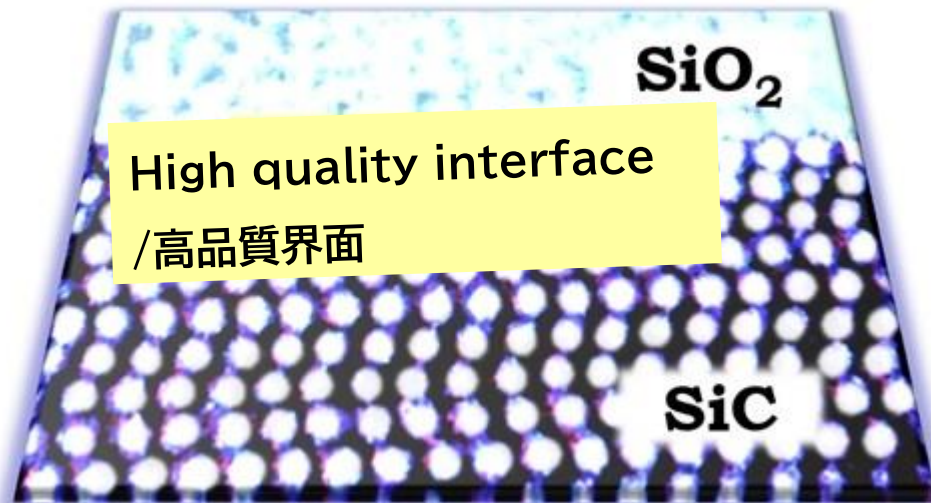
結晶中の欠陥は一般的にはデバイスの性能を悪化させる。一方で、量子センサのような欠陥は新規機能を創発する。

Defects in a crystals generally worsen the device performance.

On the other hand, defects emerges new function such as quantum sensor

Defect as a device killer

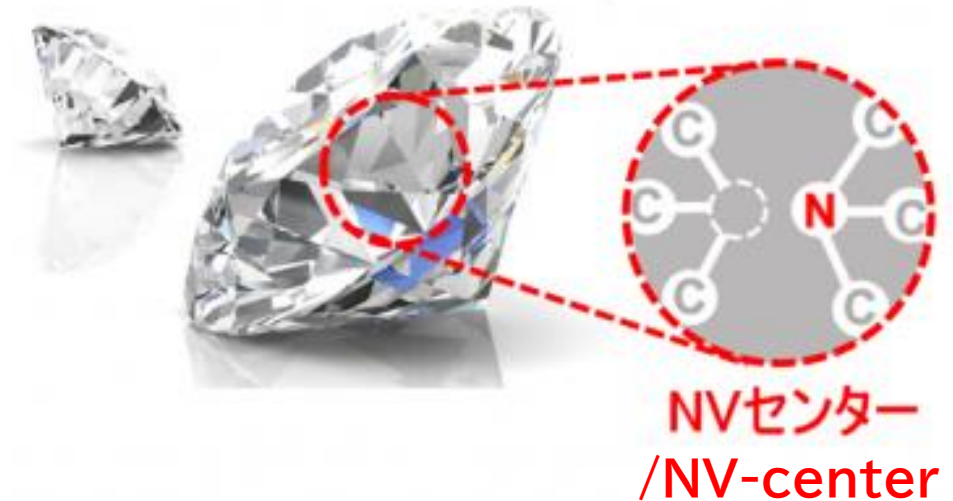
/デバイスキラーとしての欠陥



Kobayashi, Matsushita et al., APE 13, 091003 (2020).

Defect as a qubit

/量子ビットとしての欠陥



<https://www.qst.go.jp/site/iqls/29442.html>

Quantum sensing/量子センシング

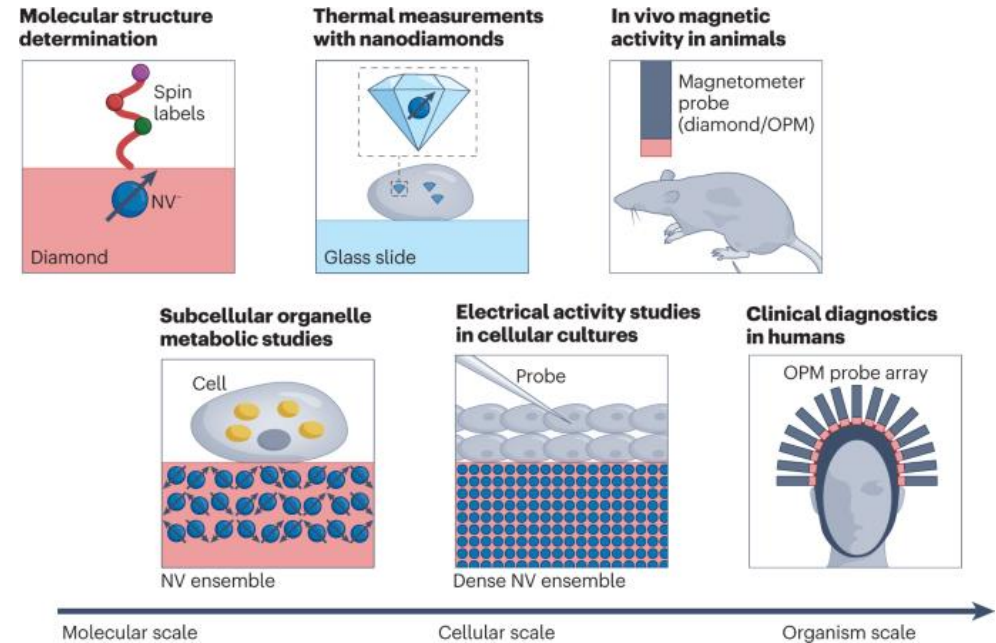
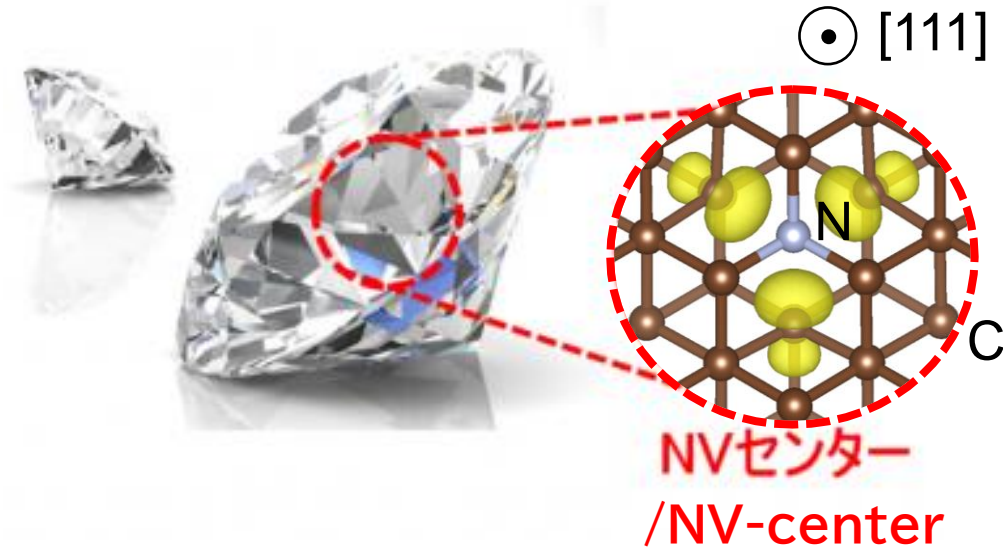
ダイヤモンド中のNVセンター近傍にスピンは局在して小さな磁石(原子レベルのコンパス)のように振る舞う。
量子センシングは磁場に対する高い感度と室温動作可能という特徴を有する。

AlNにおいてもNV中心ダイヤモンドと同様に欠陥を導入することで新しい機能の創発が可能と期待される。

Spin localized near the NV-center behaves like a small magnet (atomic-level compass).

Quantum sensing exhibits high-sensitivity and room temperature operation.

The introduction of defects can generate new functions in AlN, as in NV-center.

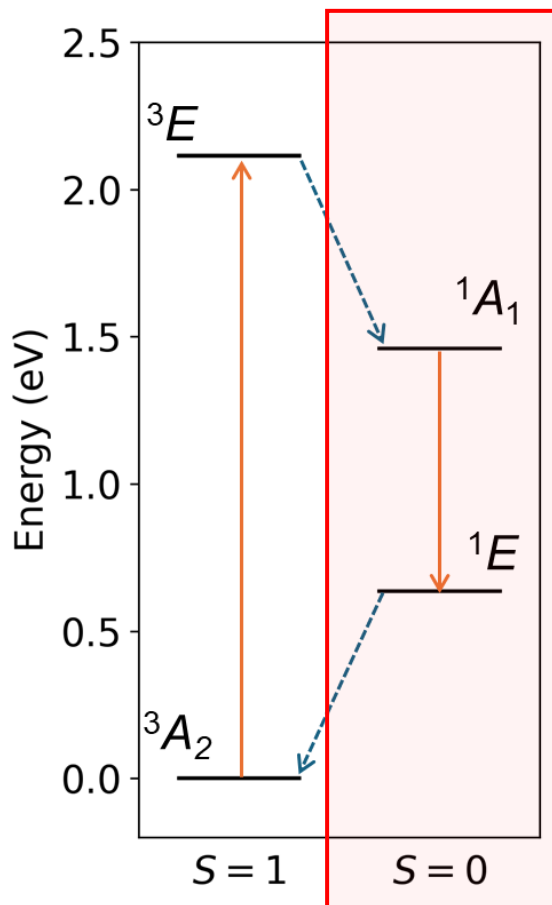


Aslam et al., Nat. Rev. Phys. 5, 157 (2023).

半導体に対して、DFTは多くの成功を収めた最もスタンダードな手法。

一方で、ワイドギャップ半導体中のスピン量子ビットの記述は難しい。

For semiconductors, DFT is the most standard and successful method. Difficult to correctly describe the spin qubit in wide-gap semiconductors.



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は**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**

Spin triplet states (S=1) is described by **single** Slater ⇒ DFT works **well**

Spin singlet states (S=0) is described by **multiple** Slaters ⇒ DFT does **NOT** work

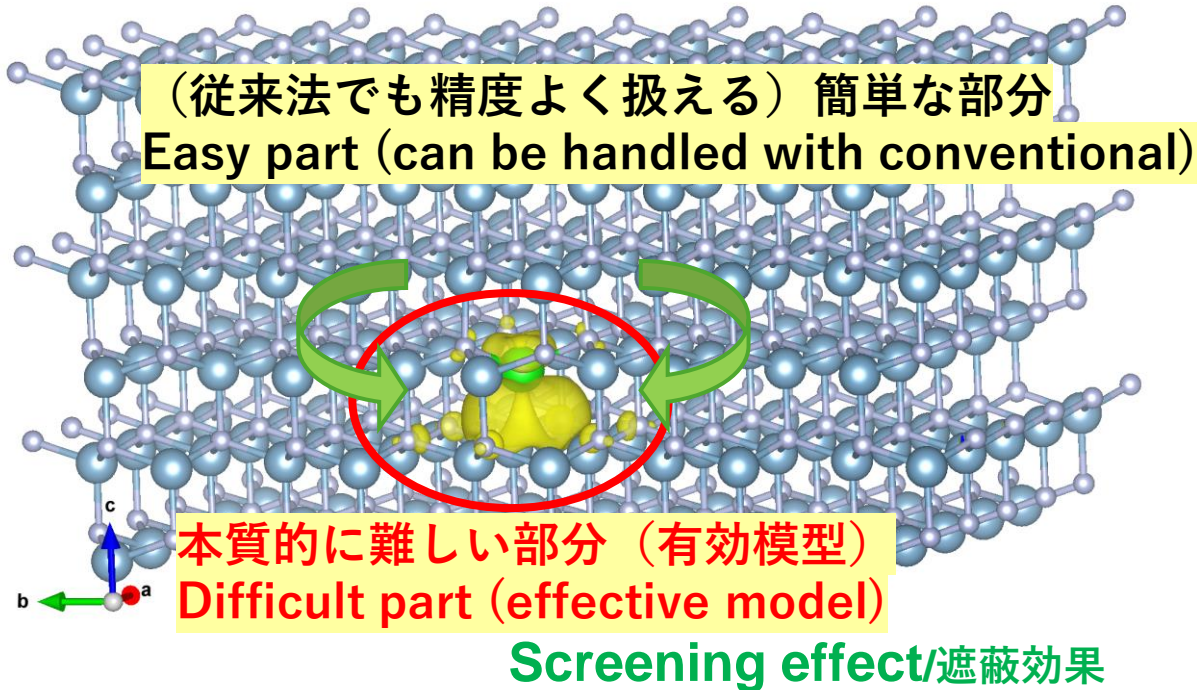
$$0.51(|e_{x\uparrow}e_{x\downarrow}a_{1\uparrow}a_{1\downarrow}\rangle - |e_{y\uparrow}e_{y\downarrow}a_{1\uparrow}a_{1\downarrow}\rangle) + 0.19(|e_{y\downarrow}e_{x\uparrow}e_{x\downarrow}a_{1\uparrow}\rangle - |e_{y\uparrow}e_{x\uparrow}e_{x\downarrow}a_{1\downarrow}\rangle) - 0.45(|e_{y\uparrow}e_{x\downarrow}a_{1\uparrow}a_{1\downarrow}\rangle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

課題: 計算モデル(結晶中の欠陥)は量子コンピュータにとっては大きすぎる

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コンピュータで解く

Problem: Computational model (defects in crystal) is too BIG for QC.

Solution: Cut out only intrinsically difficult part (called effective model) from the computational model, and use a QC to solve only that difficult part.



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ンに繰り込む
Spin qubit is isolated in crystal
⇒Renormalize effect of crystal to spin qubit

注記: 正しくはエネルギー空間で定式化
Note: formulated as energy space correctly

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

ファインマンの言った通り、量子計算機を使って量子系(スピン量子ビット)のシミュレーションを行う

Simulate quantum system (spin qubit) using quantum computer as Feynman said



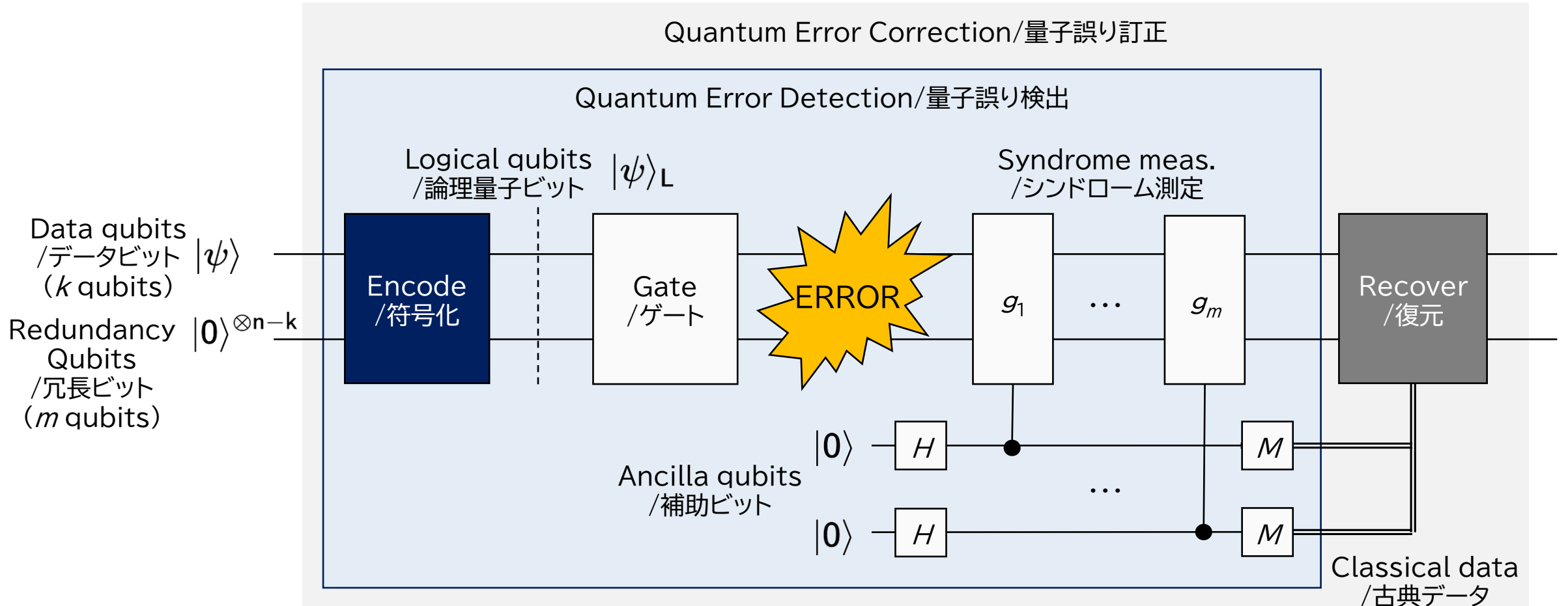
「自然は古典的ではありません。もし自然のシミュレーションをしたいのであれば、量子力学的にする必要があります。」

“nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical”

Feynman, International journal of theoretical physics, 21, 467, (1982).

FTQC時代に向けた第一歩として、QEDをPITEに実装

As a first step toward FTQC era, we implemented QED on PITE



クオンティニウムH1-1量子計算機の特徴は、QEDとPITEにとって望ましい。

Feature of Quantinuum H1-1 quantum computer, suitable for QED & PITE

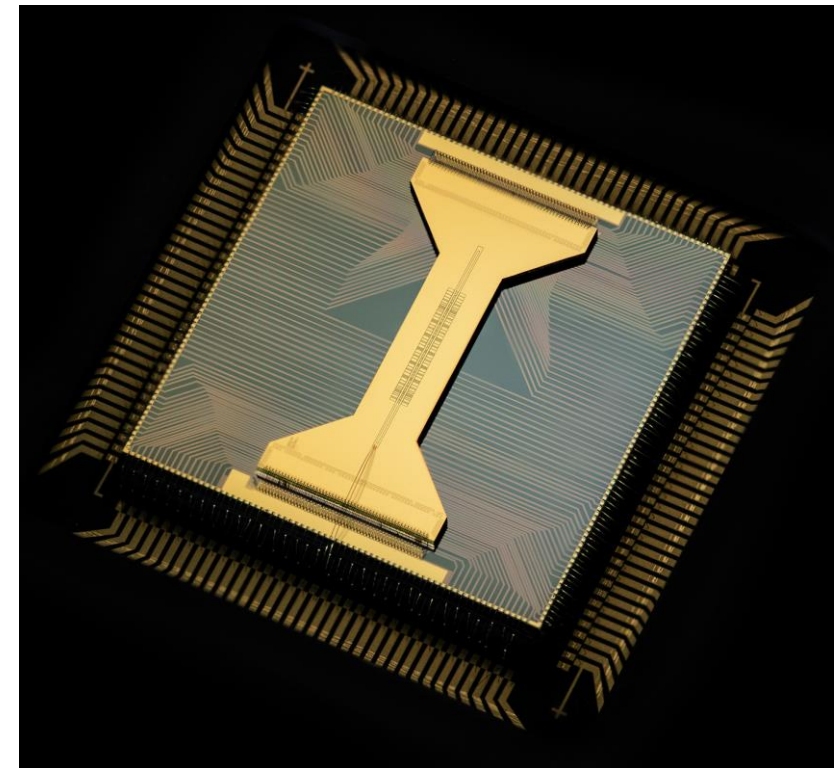
99.9%の高い二量子ゲート忠実度 High fidelity two-qubit gates, 99.9%

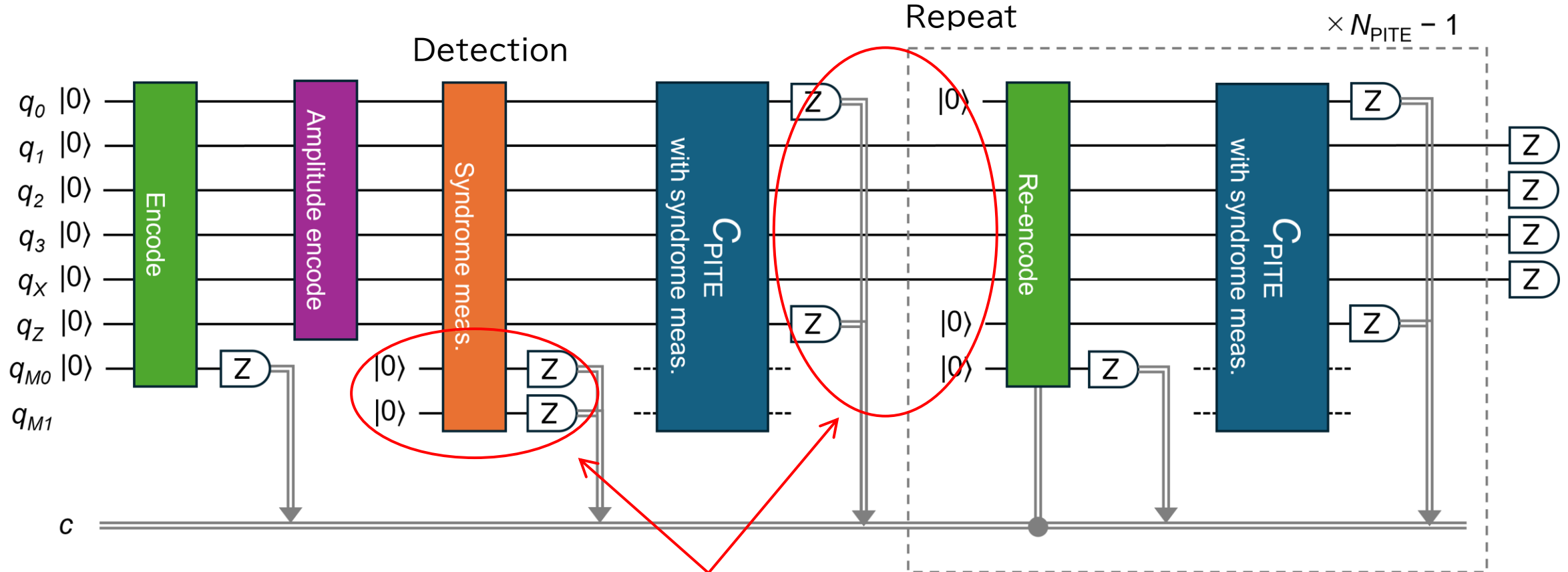
全結合 All-to-all connectivity

回路中間測定と再利用 Mid-circuit measurement and reuse



No. qubits /量子ビット数	20
Quantum volume /量子体積	2^{20}
Single qubit gate fidelity /単一量子ゲート忠実度	99.9979(3) %
Two qubit gate fidelity /二量子ゲート忠実度	99.914(3) %



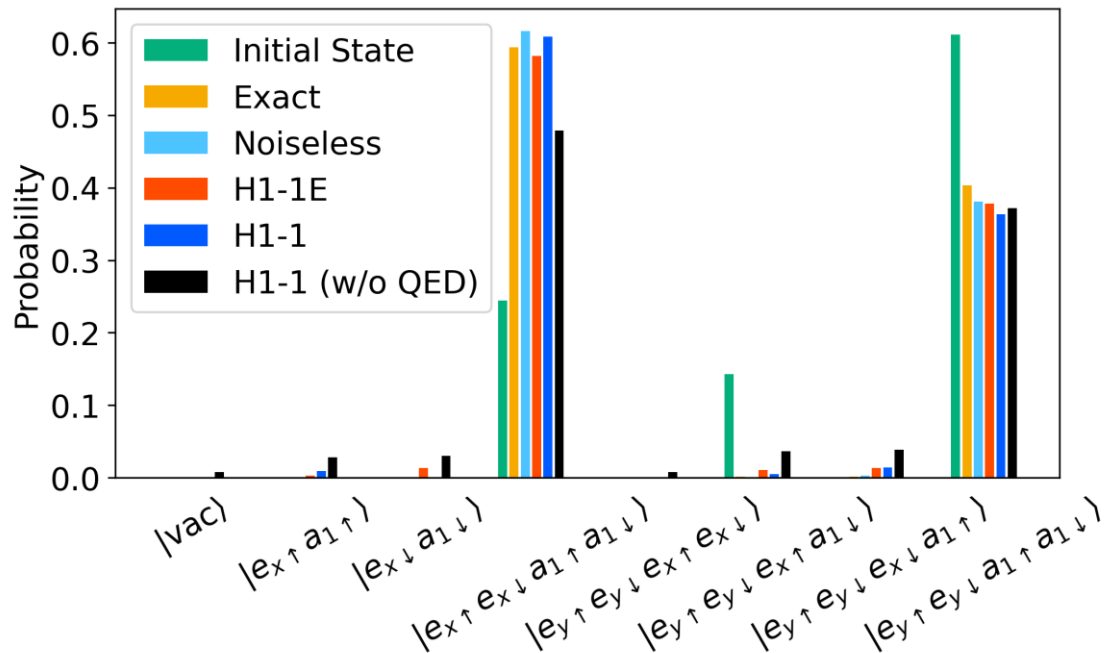


シンドローム測定とPITEの補助ビット測定で、中間回路測定と再利用
 Mid-circuit measurement & Reuse @ Syndrome meas. & PITE-ancilla qubit meas.

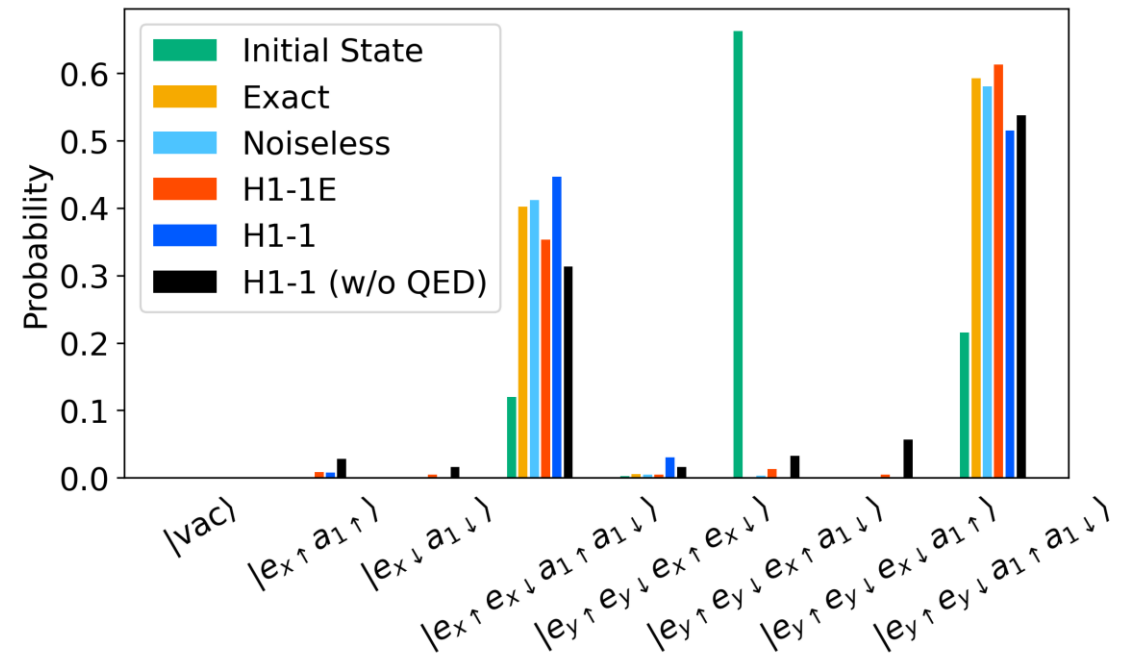
PITE[®]により、現在のイオントラップ量子コンピュータが
 基底・励起状態を理想的なFTQCの結果と比較して**98%の精度**で取得

Using PITE[®], present trapped-ion quantum computer provides ground and excited state with 98% accuracy compared to ideal FTQC results.

Ground state/基底状態



Excited state/励起状態



FTQC時代への第一歩として、実機上にQED付きのPITEを実装。

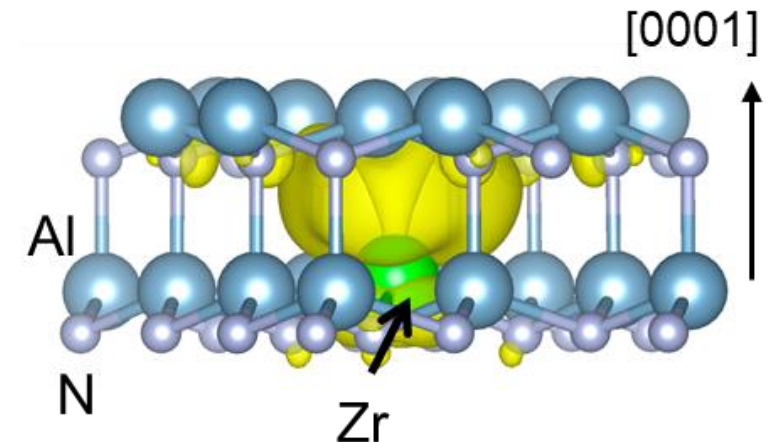
結晶中の欠陥という問題に対処するために、低エネルギー有効モデルを構築。

窒化アルミニウム中の欠陥が量子センサーとしての高い潜在性を示すことが分かった。

As a first step for FTQC era, we implemented PITE with QED on a real device.

Constructed a low-energy effective model to address defects in a crystal.

Defects in AlN exhibits high potential for quantum sensor.



Concluding remarks

さいごに

量子コンピューターへの期待 Expectations for Quantum Computer

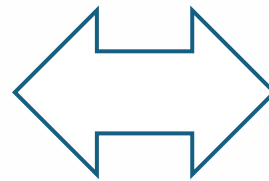
技術への期待

Expectations for Technology

誤り耐性
Fault-tolerance

量子ビット数
Number of Qubit

アルゴリズム／ソフトウェア
Algorithm/Software



業界への期待

Expectations for the Industry

的確な情報をタイムリーに提供
いただけるパートナーの存在

Partners who can provide
timely and accurate
information

FTQCに向けた共同での研究を一緒に進めていただき、旭化成様に心より感謝いたします

We appreciate innovative attempt of Asahi-Kasei.

Asahi KASEI

量子コンピュータの計算資源を提供していただき、
クオンティニウム様と三井物産様に心より感謝いたします。

We appreciate Quantinuum and Mitsui & Co., Ltd. for your computational support.



QUANTINUUM



MITSUMI & CO.



量子のチカラで、ともに未来を創ろう。

