

量子コンピュータの現状と展望：化学反応計算への応用

Current Status and Future Prospects of Quantum Computers: Application to Chemical Reaction Analysis

株式会社 QunaSys, 中川裕也

QunaSys Inc., Yuya O. Nakagawa

E-mail: nakagawa@qunasys.com

量子コンピュータのハードウェア開発が急速に進展し、量子コンピュータの産業応用に関する研究開発が盛んに行われている。これまでに実現されてきた量子コンピュータは Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) デバイス[1]と呼ばれるもので、誤り訂正機能を持たない数十から千個程度の量子ビットから構成されており、実行可能な量子ビット操作回数は極めて制限されていた。一方で、昨年ごろから集積化可能な実装を持つ量子誤り訂正の実証実験が数多くのグループから報告されるようになり[2]、誤り耐性量子コンピュータ (Fault-Tolerant Quantum Computer; FTQC)の実現へ向けた機運も高まっている。このような状況の中で、量子アルゴリズム開発の中心が NISQ デバイスの応用から黎明期の FTQC (early FTQC)を見据えた研究開発に移行しつつある。

量子コンピュータの産業応用の中で最も有力だと考えられる分野の一つが量子化学計算であり、古典コンピュータで計算すると指数的に時間のかかるような正確な結果を、量子コンピュータを用いることで効率的に計算できる可能性がある。本講演では、量子コンピュータ開発の現状をレビューするとともに、量子コンピュータによる量子化学計算のさまざまな手法やその特徴を紹介する。特に、原子層プロセスを含む化学反応解析への量子コンピュータの応用可能性について論じる予定である。

[1] J. Preskill, Quantum Computing in the NISQ era and beyond, *Quantum* **2**, 79 (2018).

[2] Google Quantum AI and Collaborators, Quantum error correction below the surface code threshold, *Nature* (2024), <https://doi.org/10.1038/s41586-024-08449-y>