

2022年7月14日

DIC株式会社

〒103-8233 東京都中央区日本橋 3-7-20
ディーアイシービル

東京大学との「量子コンピューターでのCO₂の振動エネルギー準位の計算」 に関する共同論文の発表について

DIC株式会社（本社：東京都中央区、社長執行役員：猪野薫）は、国立大学法人東京大学（以下「東京大学」）と「量子コンピューターでのCO₂の振動エネルギー準位の計算」に関する共同論文（著者：Erik Lötstedt 東京大学大学院理学系研究科 准教授、山内薫 東京大学大学院理学系研究科 教授、立川豊 当社QCCプロジェクト データサイエンスセンター長）を発表し、雑誌“AVS Quantum Science”に掲載されましたので、お知らせします。発表のポイントは以下となります。

- CO₂分子の振動エネルギー準位を、量子コンピューター [IBM Quantum System One \(ibm_kawasaki\)](#) を用いて計算した。
- 新しく開発されたハイブリッド固有値アルゴリズムと簡単なエラー抑制法を適用することにより、CO₂のフェルミ共鳴振動状態を高精度で計算した。
- この結果では、量子コンピューターが多原子分子の振動エネルギー準位の計算に有望であり、量子コンピューターが分子振動の分光研究に役立つものであることを示した。

共同論文の詳細につきましては、[東京大学 理学系研究科・理学部ウェブサイト](#)よりご確認いただけます。

今回、CO₂の振動エネルギー準位を正確に計算できることを実証することにより、量子コンピューターが振動分光學に役立つ可能性があることを示しました。これからは、より多くの量子ビットを使用して、より大きな多原子分子の振動エネルギーを計算することに取り組んでいきます。また、今回新たに導入したRMC-VQE法は、振動エネルギー準位の計算だけでなく、原子や分子の電子エネルギー準位の計算にも適用できる一般的な方法であるため、原子、分子の電子状態計算への応用も期待できます。

当社は、量子コンピューターの産業利用の価値を高めるため、同分野の探索と技術の構築に引き続き取り組んでまいります。特に[量子イノベーションイニシアティブ協議会\(QII\)](#)への参画により、東京大学と連携して、材料開発に有益な化学シミュレーションに資する技術の研究と開発に注力します。

以上

News Release



【関連リリース】

東京大学を拠点とする「量子イノベーションイニシアティブ協議会」の設立メンバーに参画（20年7月発表）

https://www.dic-global.com/ja/news/2020/r_and_d/20200729162725.html