

# DIC株式会社

## ibm\_kawasaki の活用方法

- ・原子・分子に関わる様々な量子プロセスを量子計算によってシミュレーションし、量子コンピューターによって拓かれる新しい基礎化学・応用化学の分野を探索する
- ・IBMの量子コンピュータ実機を用いて様々な分子の計算を実施しエネルギー精度などを検証中

## 活用実績のご紹介

- ・分子振動エネルギー準位計算[1]
- ・直鎖共役ポリエンの軌道エネルギー計算[2]
- ・そのほか実機を用いた各種計算[3]

[1] E. Lötstedt, K. Yamanouchi, T. Tsuchiya, Y. Tachikawa, *Phys. Rev. A* **103**, 062609 (2021)

[2] R. Yoshida, E. Lötstedt, K. Yamanouchi, “*Quantum computing of Hückel molecular orbitals of  $\pi$ -electron systems*,” *J. Chem. Phys.* **156**, 184117 (2022).

[3] E. Lötstedt, K. Yamanouchi, “Comparison of current quantum devices for quantum computing of Heisenberg spin chain dynamics,” *Chem. Phys. Lett.* **836**, 140975 (2024).