

第67回 新大先端化学セミナー

主催：総合学術研究科基礎化学分野/自然科学研究科化学コース/理学部
化学プログラム

共催：ユビキタスグリーンケミカルエネルギー連携教育研究センター

日時：2026年8月25日14:45-15:30

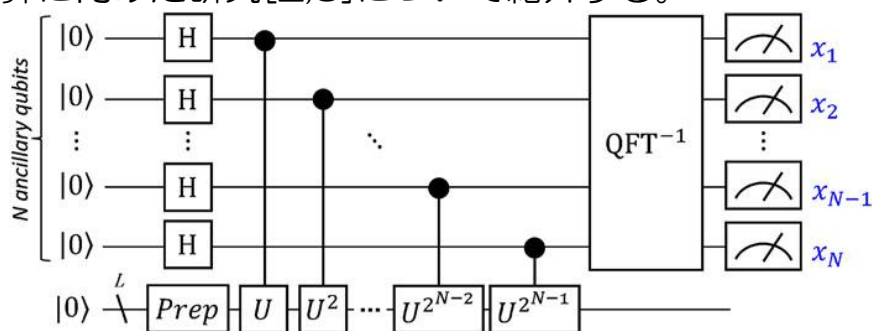
場所：物質生産棟161

演題：量子コンピュータを用いた精密な分子間
相互作用エネルギー計算に向けて

演者：杉崎研司 博士
(合同会社デロイト トーマツ)



概要：量子力学原理に基づき動作する量子コンピュータは特定の問題を従来のコンピュータよりも良い計算コストスケーリングで解くことができるかと期待されている。なかでも量子化学計算は量子コンピュータの有望な応用先として近年盛んに研究が進められている。量子コンピュータによる量子化学計算を実社会問題へと適用するためには、より大きな分子を、より高精度に、より速く計算することが求められている。本発表では量子コンピュータを用いた大規模量子化学計算に向けた、量子計算とフラグメント分子軌道法の接続に関する研究[1]、および分子間相互作用エネルギーの高精度計算に向けた研究[2,3]について紹介する。



after AIP Adv. **2024**, 14, 095021.

[1] K. Sugisaki, T. Nakano, Y. Mochizuki, *J. Comp. Chem.* **2024**, 25, 2204.

[2] K. Sugisaki, *AIP Adv.* **2024**, 14, 095021.

[3] Y. Tachi, A. Arakawa, T. Osawa, M. Terabe, K. Sugisaki, *arXiv:2512.04587*.

問い合わせ先：理学部化学プログラム 生駒忠昭 (ikoma@chem.sc.niigata-u.ac.jp)