

## 新材料開発のための材料シミュレーション マテリアルドックと量子コンピュータ

東京工業大学 物質・情報卓越教育院 松下 雄一郎

### 1. 新材料開発と SDGs

持続可能な開発目標(SDGs)への社会の関心が年々高まっている。SDGsの達成手段を考えていると、新材料開発が深くかかわっていることがわかる。安全な水を世界中に普及させるには、更なる高性能な水処理膜の開発が必要である。クリーンなエネルギーの生成技術としては、高機能な人工光合成材料の開発などが重要な課題としてあげられる。薬も材料の一種であると考え、全ての人々が健康に生きられる社会を実現するためにも、材料開発(創薬開発)と切っても切れない関係であることがわかる。

20世紀最大の科学界の成果は、「物質は原子という構成要素の集合体である」という、ものの見方が確立したことであろう。今となっては普通になってしまった「物質は原子からできている」という概念も、確立したのはまだまだ100年ちょっと前のことである。どんな材料も、たかだか120種類程度の元素をレゴブロックのごとく組み合わせで作られた構造体なのである。しかし、問題はその組合せの場合の数の多さである。ひとえに、材料は $10^{60}$ 個の可能性があるとも言われ、人類が手にした材料はその内のほんのひと握りにすぎない。さらには、材料に原子レベルやマイクロレベルでの微細構造の加工を行うことにより、元々物質に備わっていた性質を改変したり、新しい特性を生み出したりといったことが可能である。実際に、物質に異元素ドーピングや、ナノテクノロジーによる微細加工により、母物質にはなかったまったく新しい性質を創発したりさせたりということは日常的に行われている。こういった物質の微細構造制御という自由度まで考慮すると、材料の可能性は $10^{60}$ をはるかにこえて、無限大と言っても過言ではないだろう。まだ人類が合成したことのない物質の中には、人類社会を大きく変えるポテンシャルをもった怪物的な材料が眠っているはずなのである。

### 2. 材料シミュレーションへの期待

材料の可能性は無限に広がる、まるで宇宙のような広大な空間であることを説明してきた。これまでの材料科学は、その可能性を1つ1つ手で合成し、測定し、をくり返しながらかつてきた。SDGs達成に向け、今、この材料開発スピードを飛躍的に向上させる術がないか、その模索が世界的にも大きな関心となっている。その文脈で殊更大きな注目を集めている1つが、材料シミュレーションである。材料シミュレーションは、コンピュータ上のバーチャルな空間中で、新材料合成を行い、シミュレートすることにより材料特性を予言する、または(その材料特性の微視的メカニズムを)解析することを可能にする。特に新材料探索の観点から、材料を実際に合成する前に、その材料特性を予言できる点が注目を集めている。実際に近年、超高压下での高温超伝導体の発見が相次いでおり、(超高压下において)室温超伝導実現まであと一息のところまできている。例えば2019年、180-200 GPaの超高压下LaH<sub>x</sub>において、超伝導転移温度260 Kが報告された<sup>1)</sup>。この歴史的発見の背後には、実は材料シミュレーションが大きく貢献をしている。実験を先導する形で続々と材料シミュレーションによる結果が報告され、実験を刺激し続けている状況である。このように、材料シミュレーションは新材料開発研究を大きく加速するポテンシャルを秘めているのである。

材料シミュレーションがここまで大きく発展した理由の1つは、コンピュータの指数関数的性能向上である。コンピュータは、1.5年で2倍のコンピュータ演算処理能力を獲得するというムーアの法則に従う形で発展が続いてきた。この指数関数的なコンピュータ処理能力の発展のおかげで、以前では到底考えられなかったような高度な計算処理が可能となったのである。このようなコンピュータの飛躍的な発展のお陰で、現在では気軽に材料シミュレーションを実行することが可能となり、その裾野はどんどん拡大している。

### 3. マテリアルドックによる網羅的データベース

高機能な新材料を開発するうえで、材料シミュレーションが強力なツールとなりえることを説明してきた。以下では、材料シミュレーションを用いていかにして新材料を開発していくのか、その戦略に関する部分を説明する。

産学官問わず、われわれは所定の特性値をもつ高機能材料を探し、日々や新しい物質の合成を行っている。もちろん、ねらった通りには材料特性は出ずに苦しい日々を過ごす。一方で、ある人からすると興味のない材料特性でも、別のある人からするととても魅力的な材料特性であることは十分にある。さらには、昔から知られた物質であっても、まだはかられたことのない材料特性があり、実は素晴らしい特性を秘めているかもしれない。はたまた、室温での特性は平凡かもしれないが、極低温での振る舞いは世界を変える非凡な性質をもっているかもしれない。つまり、既存の物質でさえ、われわれのもっている材料データベースは実は穴だらけなのである。客観的かつ網羅的な、そして広範な環境(圧力、温度など)下での材料特性データというものが存在しないのである。みんな、自分の興味がある特性値を測定して、所望の特性値を有していないことがわかると、その物質にはそれ以上の注目をせず次物質合成に取りかかってしまう。実際に、既存の物質ですらまだ認識されていない特異な材料特性をもっていることがわれわれのグループでのシミュレーション結果から次々と見つかっている。人は見ているようで見ていないのである。網羅的な材料データベースを作ることはそういった見落としを防いでくれる。

網羅的な材料データベースを作製するうえで重要な考え方が、マテリアルドックである。われわれ人間は毎年、人間ドックというものを受けるが、その考え方を材料開発に応用しようというものである。合成された物質はあまねく、ロボット・自動化の力を借りて、さまざまな材料特性値が測定され、データベースにストックされていく。当然のことながら、測定される特性値としては十分な検査項目がそろっていないと意味がない。これは人間ドックの場合で考えてみると、説明の必要もない。実のところ、このマテリアルドックという考え方は、実験サイドか

ら出てきた考え方であるが、われわれのグループでは、このマテリアルドックという考え方は材料シミュレーションとの組合せが非常に強力になると考えている。実験的に、(数K程度の)極低温から(1000K程度の)高温領域まで、さらには圧力環境下、外部磁場環境下、さまざまな環境下で広範囲な測定を行うのは装置の観点から実現はとても難しい。一方で、材料シミュレーションは、そういった実験の難しさとは無縁だからである。

実際に、われわれのグループでは、材料シミュレーションによるマテリアルドックを実行すべく、材料シミュレーション手法の開発を進めているところである。材料シミュレーションを用いてマテリアルドックを実行するうえで、重要な要素は“精度”である。われわれのグループでは、さまざまな材料特性を高精度に計算するシミュレーション手法の開発を最重要課題と考え、研究開発を進めている。本稿では、最新の材料シミュレーションの結果を1つ紹介する。

図1は、磁性材料における材料シミュレーションの結果である。図1(a)には、代表的な磁性材料として鉄を取りあげ、電気抵抗値のシミュレーション結果と実験値との比較を示している。シミュレーションが電気抵抗値を低温から高温領域に至るまで広範囲かつ高精度に実験を再現しているようすがわかる。今の材料シミュレーションは、原子構造の情報のみ(それ以外には、実験の情報をまったく用いない状況)からこの精度で実験を再現しつつある。図1(b)は、冷媒ガスを使わない新しいエアコン冷却技術として期待されている、磁気熱量効果を説明する図である。外部磁場環境下において、磁性物質

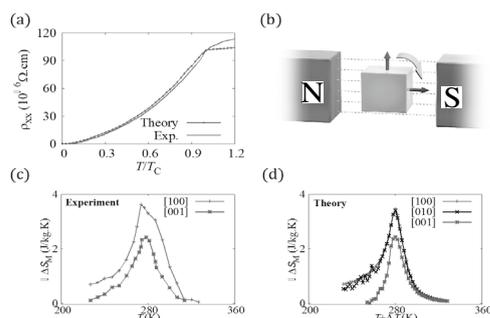


図1 磁性材料シミュレーションと実験値の比較。(a) 鉄の電気抵抗値の場合(キュリー温度  $T_c=1043\text{K}$ )。(b) 磁気熱量効果の説明図。(c, d)  $\text{AlFe}_2\text{B}_2$  の磁気エントロピー変化量の実験値<sup>2)</sup> (c) とシミュレーション結果<sup>3)</sup> (d)。

を回転させることにより、磁気エントロピーが変化し、発熱・吸熱を起こしてエアコン冷媒として機能する。特に、近年はエアコン冷媒ガスの温室効果が問題視されており、磁気熱量効果は冷媒ガス材料の代替として期待が寄せられている。図 1(c), (d) では、 $\text{AlFe}_2\text{B}_2$  の外部磁場方向依存性まで含めた磁気エントロピー変化量の実験値(c)とシミュレーション値(d)を比較している。磁気エントロピーが大きいほど、磁気熱量効果が大きい、有望な磁気材料であることを示す。エントロピー変化量のピーク位置や幅など、よく実験を再現しているようすがわかる。

ほかにも、われわれのグループでは超伝導物質の超伝導転移温度の材料シミュレーションなど、さまざまな材料特性値を計算する計算手法開発を進めている。

#### 4. デバイスシミュレーションとのドッキング

ここまでは、どのような元素がどのような構造をもって集合体を形成しているか、という原子レベルの情報から、その材料がどのような性質を示すかを予言・解析できることを説明してきた。一方で、産業的には材料特性値そのものより、もっとマクロな量であるデバイス特性に興味をもつケースも多い。結局、その材料でデバイスをつくった際に、デバイス特性がどうなるかに対する興味である。実際に、原子レベルの材料シミュレーションの結果から所望の材料特性値を抽出し、その後のデバイスシミュレーションへのインプットへとつなげる動きも加速している。それにより、原子レベルの材料の情報から、デバイス特性まで一気通貫でシミュレーションすることも可能になってきた。図 2 において、実際にシリコンナノワイヤの材料シミュレーションからデバイス特性までを行なったわれわれのグループでの成果を示す。実験との比較をすることにより、いかに精度よく実験を再現しているかがわかる。

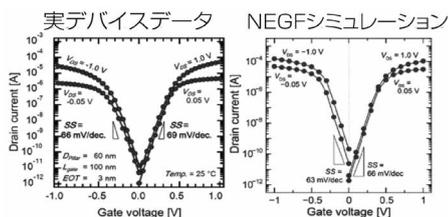


図 2 シリコンナノワイヤのデバイスシミュレーションと実験の比較<sup>4) 5) 6)</sup>。

#### 5. 量子コンピュータへの期待

ここまで材料シミュレーションの大きな成功の背後にはコンピュータ演算能力の指数関数的成長があることを説明してきた。材料シミュレーションへの期待が日に日に増すなかで、より高度な材料シミュレーションを行いたいという欲求が増している。より高精度、大規模な材料シミュレーションへの欲求である。しかし、今のコンピュータの成長速度では、その期待に応えられる時期は当分先になる見通しである。なんとかして、今のコンピュータの演算能力を大きく凌駕するコンピュータを実現し、材料シミュレーションの発展を加速させたい。このような社会的情勢の中、近年、量子コンピュータが大きな注目を集めている。特に、2019年に Google が発表した量子超越のニュースは世界中の人が知ることとなった<sup>7)</sup>。それは、今の世界最高のスパコンをもってしても 1 万年かかる計算を、量子コンピュータは 3 分で解いてしまったというものであった。

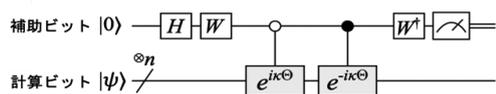
われわれのグループでは、量子アルゴリズムを開発し、材料シミュレーションを高速化する研究開発を進めている。この節では、その研究成果と将来の材料シミュレーションの展望を紹介する。ここで、量子アルゴリズムに関して 1 点注意をすべきことがある。従来型コンピュータ(古典コンピュータともよぶ)において、基本演算は四則演算である。例えば微分や積分などもある精度の範囲において四則演算で近似して演算を実行していくのである。一方で、量子コンピュータにおける基本演算は「ユニタリ演算(ある種の回転を一般化した演算。ゲート操作ともよぶ)」と「観測(パウリ演算子のある固有空間への射影演算)」というものになる。量子コンピュータ上においては、所望の計算値を得るために、ユニタリ演算と観測を適切に配置する(例として図 3)。当然ながら、基本演算が異なるので、古典コンピュータ上で動くソフトがそのまま量子コンピュータ上で動くわけではない。また、古典コンピュータで効率のよいアルゴリズムが必ずしも量子コンピュータ上でも量子コンピュータの性能を引き出すわけでもないことに注意してもらいたい。量子コンピュータと相性のよいアルゴリズムの開発は重要な研究課題である。

さて、われわれのグループでは虚時間発展法という名で昔から知られたアルゴリズムに着目し、対応

する量子コンピュータ上でのアルゴリズムを開発してきた。図3に、われわれが開発した量子コンピュータ上で実現する虚時間発展法の量子回路を示す<sup>8)</sup>。

実際に、この虚時間発展法アルゴリズムを量子コンピュータ上で実行することにより、材料シミュレーションを実施することができる。さらに、われわれは上記虚時間発展法を量子コンピュータ上で実現した際に、計算速度が従来型コンピュータに比べて指数関数的に加速することを報告した。量子コンピュータが実用段階に入った際は、これまで以上の精度、速度の計算が実現できるようになる。これは材料開発研究に大きな革命をもたらすものであろう。

一方で、量子コンピュータの実活用には、まだ時間が必要であろう。一番大きな問題は、ハードウェアにおいてノイズの影響が大きく、ノイズにうもれて有意義な計算結果を抽出できないことである。量子コンピュータに生じているノイズの微視的な理解もまだまだ未解明な部分も多く、課題が山積している。また、ノイズの発生原因として、宇宙線や地殻変動などの関係も指摘されており、完全なノイズ除去は不可能であろう。そのため、エラー耐性アル



$$W \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \quad \Theta \equiv \arccos \frac{M + \sqrt{1 - M^2}}{\sqrt{2}}$$

図3 虚時間発展法の量子アルゴリズム<sup>8)</sup>。横線は各量子ビットに対する時系列を表し、四角が各量子ビットへのゲート操作を表す。 $H$ と書かれたゲート操作はアダマールゲート操作、メーターが描かれた四角が測定を表す。 $M$ は虚時間発展演算子を表す。量子回路図は左から右へ向かってゲート操作や観測を実施する時間順序を描いている。

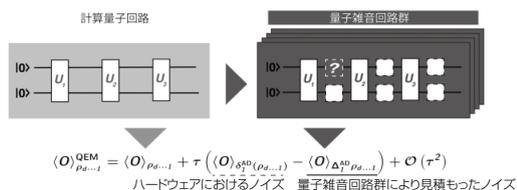


図4 エラー低減のための量子アルゴリズム<sup>9)</sup>。もとのオリジナルな量子回路(左図)に対し、量子ノイズを模した量子回路(右図)へと変更を行い、そこで得られた結果からエラーの効果を低減する演算を行う(下式)ことで、量子ノイズの低減を行う。

ゴリズムの実装が急務となっている。われわれは、現在ノイズがゼロにしきれないのであればと、イヤホンのノイズキャンセリング機能のように、エラーを低減するアルゴリズムの開発にも取り組んでいる。実際に、図4の技術を用いることにより、大幅にエラーを低減できる可能性が示され始めている<sup>9)</sup>。

以上のようにわれわれのグループでは、量子コンピュータ時代の本格的な到来を少しでも早めるべく、エラーやノイズの制御を目指し、研究開発を行なっている。日本の量子コンピュータ研究におけるプレゼンス拡大につながればと考えている。

## 6. 結び

本稿では、材料開発の難しさと楽しさ、材料シミュレーションへの大きな期待を紹介した。特に、マテリアルドックという網羅的な材料特性データの生成が有効で、例として現在のわれわれの研究活動を紹介した。さらには、材料シミュレーション分野において量子コンピュータの利活用が注目を集めており、われわれがオリジナルなアルゴリズム開発を進める中で、実際に従来型のコンピュータと比べて指数関数的な高速化が可能であることが見出されてきたことを述べた。これらの技術が成熟してくると、これからの10～20年で材料シミュレーションの世界は大きく発展することは間違いないだろう。さらに、材料シミュレーションが材料開発を加速し、SDGsを達成し、よりよい社会の到来を実現化するであろう。自分が未来社会を形づくる人間活動に参画しているのだと思うと、とても嬉しい。材料開発は本当にワクワクさせてくれる難しい研究分野である。

### 参考文献

- 1) M. Somayazulu, et. al., Phys. Rev. Lett., 122, 027001(2019).
- 2) R. Barua, et. al., J. Alloy Comp. 745, 505 (2018).
- 3) H.B. Tran, et. al., Phys. Rev. B 105, 134402 (2022).
- 4) T. Imamoto, et. al., Jap. J. Appl. Phys. 54, 04DC11 (2015).
- 5) G. Milnikov, et. al., 2017 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices 349 (2017).
- 6) 大阪大学 森研究室, 「省エネルギーデバイスのシミュレーション」  
[https://fugaku-semicon.jp/jointmtg21/files/1208\\_1640\\_Mori.pdf](https://fugaku-semicon.jp/jointmtg21/files/1208_1640_Mori.pdf)  
 (アクセス日:令和4年7月21日)
- 7) F. Arute, et. al., Nature 574, 505 (2019).
- 8) T. Kosugi, et. al., arXiv:2111.12471 (2022).
- 9) Y. Hama, et. al., arXiv: 2205.13907 (2022).