



Квантовые вычисления для новых материалов

2025

УДК 53

ББК 22.3

Квантовые вычисления для новых материалов
Аналитический доклад
А.Р. Ефимов, С.С. Страупе, А.К. Федоров, А.П. Гугля
ПАО «Сбербанк», 2025 — 66 с

В аналитическом докладе представлена оценка текущего состояния и сделаны выводы о развитии квантовых вычислений и потенциале их применения к задачам материаловедения.

Исследование будет полезно представителям бизнеса, институтам развития и научного сообщества.

Аналитический доклад подготовлен коллективом авторов ПАО «Сбербанк» в партнерстве с Российским квантовым центром (ООО «МЦКТ»).

Аналитический доклад сформирован с учетом материалов, представленных Госкорпорацией «Росатом», Российским квантовым центром, а также рядом авторитетных российских и зарубежных источников.

Приветствие



Андрей Белевцев

Старший вице-президент, руководитель блока «Технологическое развитие» Сбербанка

В последние годы квантовые технологии стали одной из самых динамично развивающихся областей, привлекая внимание как исследователей, так и инвесторов. В условиях глобальной конкуренции корпорации и страны стремятся развивать свои инициативы, создавая национальные программы и привлекая средства для исследований и разработок уже готовых продуктов. Совершенно не случайно, AI и квантовые вычисления стоят рядом в списках критических технологий ведущих мировых держав. Сбер также в прошлом году создал Центр квантовых технологий, который занимается разработками в новой области.

Эти технологии обещают революционные изменения в самых разных отраслях, поэтому все технологические лидеры заняты поиском первых практических применений квантовых вычислений. Наш анализ показывает, что они лежат в трех главных областях. Во-первых, они повысят эффективность финансовых рынков благодаря мгновенному анализу огромных объемов данных. Во-вторых, позволят существенно оптимизировать логистику и управление цепочками поставок. В-третьих, дадут мощный толчок медицине благодаря моделированию сложных биологических систем и значительному снижению стоимости и сроков разработки новых фармацевтических препаратов.

Еще один пример - квантовые вычислительные мощности позволят создавать нейронные сети, способные обучаться и адаптироваться в реальном времени. Какие еще задачи смогут решать такие системы – мы сейчас даже не можем представить.

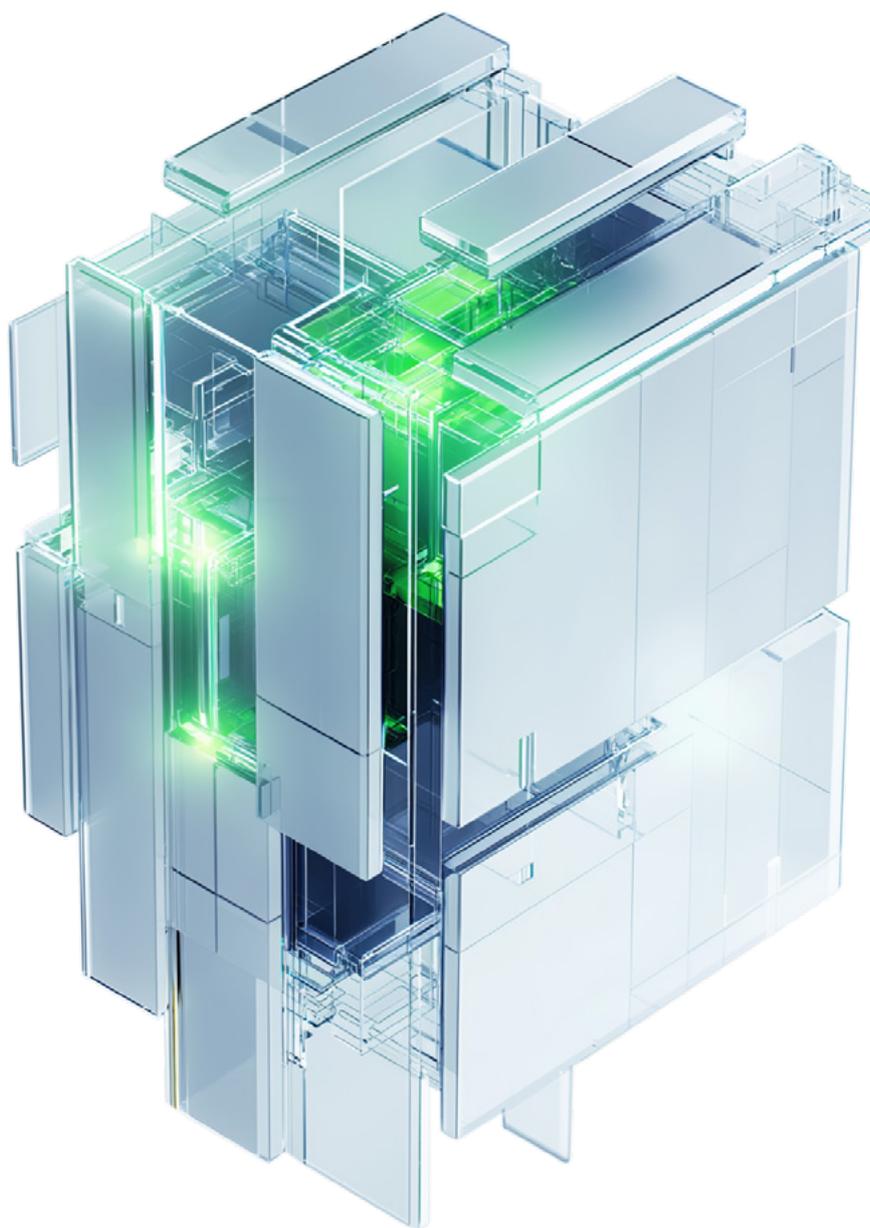
Кроме того, квантовые технологии изменят подход к разработке новых материалов благодаря их способности моделировать и анализировать сложные системы на атомном уровне. Таким образом ученые смогут лучше понимать свойства веществ и задавать их характеристики. В частности, с помощью квантовых вычислений можно точно предсказать поведение химических соединений, что позволит быстрее разрабатывать новые катализаторы, лекарства или материалы для аккумуляторов. Эти технологии позволят продвинуться в понимании явления сверхпроводимости, а значит, сделать передачу электроэнергии значительно эффективнее и дешевле. Найти новые применения квантовым точкам, создавать молекулярные машины, обеспечивать безопасность связи, интернета и многое другое.

Чтобы читатели нашего отчета, работники компаний могли лучше ориентироваться в возможностях, которые могут дать «кванты» бизнесу, мы совместно с Российским квантовым центром подготовили отчет «Квантовые вычисления для новых материалов».

В документе приводится оценка стадии развития квантовых вычислений в России и мире, рынка квантовых технологий и новых материалов, а также инвестиционного ландшафта. Дается обзор перспективных направлений в квантовых вычислениях, кейсы применения таких технологий для решения задач по проектированию новых материалов, представлена карта квантовых алгоритмов для материаловедения, информация о наиболее мощных

квантовых вычислителей и многие другие данные, которые, я уверен, будут полезны и топ-менеджерам, и представителям научного сообщества.

Приглашаю всех заинтересованных в практическом применении квантовых вычислений к сотрудничеству в исследованиях и совместном внедрении результатов!



Кванты, материя, ... сознание?



Альберт Ефимов

PhD, вице-президент, директор Управления исследований и инноваций Сбербанка, заведующий кафедрой инженерной кибернетики НИТУ «МИСИС»

Поразительные открытия теоретической физики сто лет назад позволили человечеству осознать, что существует микромир, устроенный по совершенно другим законам — нам очень сложно представить себе его устройство. Но целый век квантовой физики научил нас использовать эти законы и позволил создавать технологии, продукты и сервисы на их основе. Совершая любые вычисления, определяя местоположение или просто проверяя уведомления на экране смартфона мы пользуемся квантовыми эффектами.

То, что вначале было очень теоретической наукой, сегодня стало просто базой для развития невероятного количества применений и в науке, и в бизнесе. Потенциал квантовых технологий мы только начинаем по-настоящему видеть сейчас. Этот потенциал сформулировал 44 года назад Ричард Фейнман, когда пророчески указал, что только квантовый вычислитель сможет симулировать квантовые эффекты вещества. Почти одновременно эту идею высказал наш соотечественник Юрий Манин. Однако без мощного теоретического обоснования, сделанного лауреатом Научной премии Сбера Александром Холево в 1971 году, мы бы не смогли сейчас говорить о практическом применении квантовой информатики.

Холево является одним из родоначальников квантовой теории информации — быстро развивающейся научной дисциплины, изучающей возможности использования квантовых систем для создания новых информационных технологий. Его исследования имеют важное прикладное значение для квантовой криптографии, квантово-оптических систем связи и квантовых вычислений.

В 2023 году мы выпустили наш первый аналитический отчет¹, посвященный квантовым вычислениям, их практическому применению в бизнесе. В этом отчете мы отмечаем роль квантовых компьютеров в химической промышленности, разработке новых материалов и лекарств.

«Возможный экономический эффект в мире к 2035 г. от квантовых вычислений только в четырех индустриях, наиболее готовых к внедрению этой технологии, оценивается в \$1,3 трлн», — говорится в документе об автомобильной промышленности, финансовых услугах, химической промышленности и науках о жизни. Второй выпуск нашего ежегодного отчета мы хотели бы как раз посвятить этой важнейшей теме.

Совместно с нашими партнерами мы представляем всесторонний анализ текущего состояния и перспектив развития квантовых материалов и квантовых материалов для квантовых вычислений. Мы рассмотрели ключевые области их применения и выделили примеры успешных внедрений. Так, исследования новых материалов, обладающих уникальными свойствами, с помощью квантовых вычислений, могут дать совершенно новый взгляд на материаловедение. Это и прогнозирование химических реакций, и разработка новых катализаторов, и создание более совершенных топливных элементов. Сегодня работами в этих направлениях занимаются VW, Nissan, Airbus и другие крупнейшие корпорации мира. Например, для моделирования структуры обычного лекарственного средства, такого как пенициллин, требуется моделирование системы из 41 атома, для чего необходим классический вычислитель с размерностью регистра 10^{86}

¹ «Квантовые вычисления: Перспективы для бизнеса» <https://sberlabs.com/common/assets/sberlabs/7bpc0a90i6cv71li50lyykc3vpf1b.pdf>

² “Where Will Quantum Computers Create Value—and When?” <https://www.bcg.com/publications/2019/quantum-computers-create-value-when>

³ “Moderna and IBM to Explore Quantum Computing and Generative AI for mRNA Science” <https://newsroom.ibm.com/2023-04-20-Moderna-and-IBM-to-Explore-Quantum-Computing-and-Generative-AI-for-mRNA-Science>

битов² — понадобится больше транзисторов, чем атомов во вселенной. Такая машина, по всей видимости, невозможна. Однако для высокопроизводительного квантового компьютера с сотнями кубитов этот тип моделирования вполне возможен.

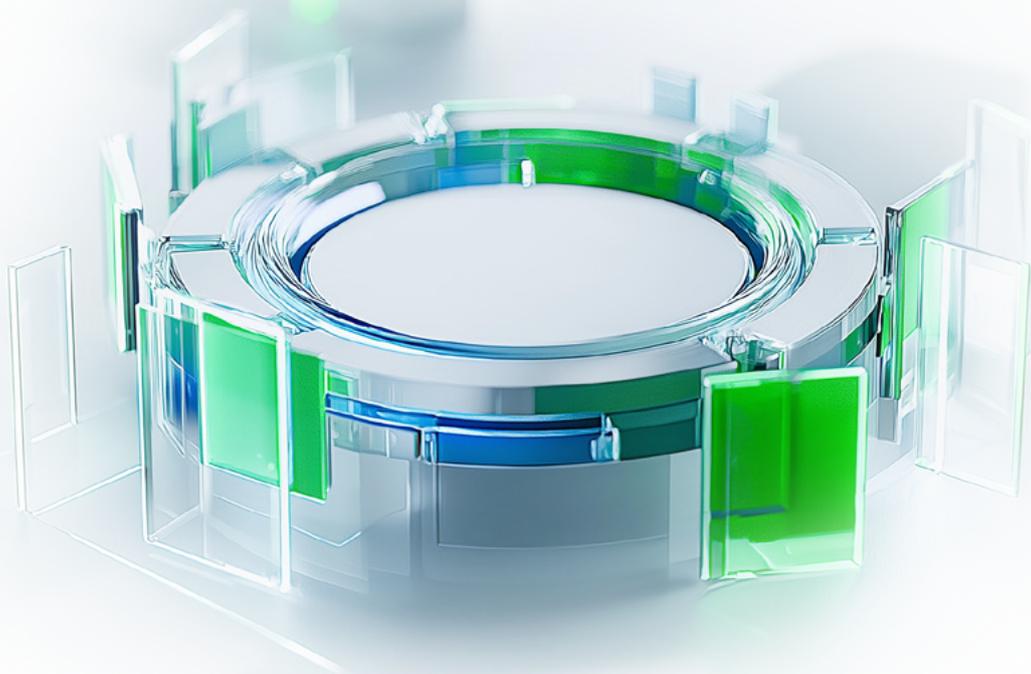
С другой стороны, разработка и получение новых материалов поможет решить значимые задачи, которые сегодня стоят на пути развития квантовых технологий, среди которых увеличение когерентности, повышение устойчивости к ошибкам, рост скорости и эффективности и так далее. Кроме того, материалы определяют архитектуру квантовых компьютеров. Например, сегодня создаются ионные, атомные, оптические, топологические и другие типы, набор элементов и физические принципы которых определяются используемыми для их создания веществами.

Если смотреть на перспективу, то, я уверен, не меньшую пользу квантовые компьютеры принесут в моделировании сотен важных химических и биологических процессов, что приведет к революционным изменениям в медицине и фармакологии. С помощью памяти квантового компьютера можно будет быстро проверять новые лекарства, средства и методы лечения: вместо того чтобы проводить тысячи сложных, дорогих и продолжительных экспериментов, достаточно будет нажать кнопку. Например, Moderna будет использовать квантовые компьютеры IBM для открытия и создания новых вакцин, а также методов лечения на основе матричной РНК. За счет комбинации методов

машинного обучения и квантовых вычислений — парадигмы квантового искусственного интеллекта — Moderna и IBM ожидают значительного ускорения при разработке новых вакцин³.

Возможно, квантовые компьютеры смогут ответить и на такие серьезные вопросы, как что заставляет здоровые клетки перерождаться в раковые, что вызывает болезнь Альцгеймера, можно ли остановить болезнь Паркинсона или замедлить старение. Квантовая революция позволит нам делать и многие другие вещи. Ожидается, что именно наука о квантовой информации поможет ответить на одни из самых глубоких вопросов человечества: что такое сознание? Как мы мыслим? Как устроен наш мозг? Сегодня эти вопросы по уровню сложности сродни пониманию устройства Природы, Жизни, Вселенной. Ответы на них позволят не только расширить наши знания, но и повысить когнитивные, эмоциональные способности, научиться ими управлять, совершив очередной рывок в человеческой эволюции.

И в завершение хочу напомнить, что ООН провозгласила 2025 год Международным годом квантовой науки и технологий (International Year of Quantum Science and Technology — IQY). Уверен, что эта инициатива еще ускорит развитие этой области и приведет к значимым открытиям.



Содержание

| | |
|---|-----------|
| Определение уровня развития квантовых технологий и новых материалов | 8 |
| Оценки уровня готовности квантовых технологий | |
| Рынок квантовых технологий и новых материалов в РФ | 12 |
| Прогнозируемый объем рынка квантовых вычислений | |
| Дорожная карта развития высокотехнологичной области «Квантовые вычисления» | |
| Комментарии Солнцевой Е.Б. (Директор по цифровизации Госкорпорации «Росатом») | |
| Ключевые характеристики приоритетных платформ реализации квантовых вычислений | |
| Комментарии Страупе С.С. (Научный руководитель центра квантовых технологий Сбера) | |
| Инвестиционный ландшафт квантовых технологий | 18 |
| Примеры анонсированных бюджетов стран на развитие квантовых технологий | |
| Примеры крупнейших компаний в области квантовых вычислений, которые получают государственные инвестиции | |
| Наиболее яркие инвестиционные сделки индустрии квантовых вычислений в 2023-2024 годах | |
| Слияния и поглощения, связанные с квантовым материаловедением и материалами для квантовых вычислений | |
| <hr/> | |
| Принципы квантовых вычислений | 21 |
| Требования к физическим системам, которые могут стать основой для квантовых компьютеров | |
| Обобщенная схема квантового компьютера | |
| Основные элементы архитектуры квантовых вычислений | 24 |
| Виды моделей квантовых вычислительных устройств | |
| Принципы квантовой механики в квантовых вычислениях | 25 |
| Типы квантовых компьютеров для реализации квантовых алгоритмов | 26 |
| Эволюция квантовых вычислений | |
| Основные вызовы на пути создания мощных квантовых компьютеров | |
| Программные эмуляторы квантовых вычислений и SDK | |
| Аппаратно-ускоренные эмуляторы квантовых вычислений | |
| Перечень языков и платформ программирования квантовых алгоритмов | |
| Облачные сервисы и маркетплейсы | |
| Квантовые и смежные технологии | 32 |
| <hr/> | |
| Квантовые вычисления в материаловедении | 33 |
| Основные методы моделирования квантовой химии | |
| Метод Хартри – Фока | |
| Метод теории функционала плотности | |
| Метод молекулярной динамики | |
| Метод USPEX | |
| Примеры компаний, применяющих квантовые вычисления для разработки новых материалов | |

Перспективные направления развития квантовых технологий и новых материалов 34

Квантовая химия и квантовая механика как основа квантовой химии

Интервью Луиса Давидовича (Профессор физики в Федеральном университете Рио-де-Жанейро)

Применение квантовых вычислений в материаловедении 40

Цикл создания новых материалов

Квантовые алгоритмы для материаловедения 42

Открытое программное обеспечение для моделирования материалов на квантовых компьютерах

Преимущества квантовых вычислений в материаловедении 43

Обзор применений квантовых вычислений для решения задач по дизайну новых материалов 47

1. Конструкционные и композиционные материалы с улучшенными свойствами
2. Углеродные наноматериалы
3. Материалы для аддитивного производства
4. Новые материалы для электроники
5. Новые материалы для агропрома и пищевой промышленности
6. Новые материалы и нанотехнологии для энергетики
7. Биомиметические материалы и материалы медицинского назначения

Новые материалы для квантовых вычислений 57

Свойства квантовых материалов

Ключевые предпосылки и требования к квантовым материалам

Направления применения новых материалов для индустрии квантовых вычислений 60

Физические основы разных типов квантовых компьютеров

Направления применения новых материалов в индустрии квантовых вычислений

Процесс разработки материалов для квантовых компьютеров

Обзор научно-технологических трендов по применению новых материалов

Применения двумерных материалов для реализации кубит

Исследования квантовых материалов в мире 63

Ключевые выводы отчета 65

Определение уровня развития квантовых технологий и применения квантовых вычислений для материаловедения

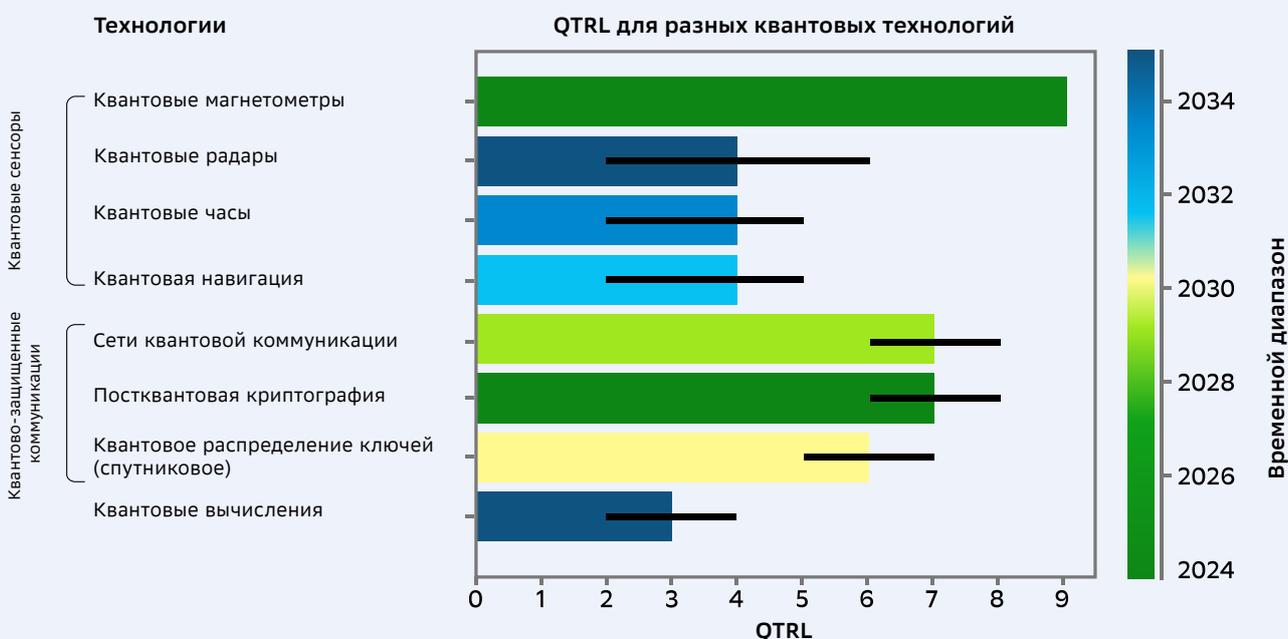
Для квантовых технологий международным сообществом разработана специализированная методика оценки уровня готовности технологии — Quantum Technology Readiness Level (QTRL)¹. Основными направлениями квантовых технологий являются квантовые вычисления — разработка высокопроизводительных устройств и алгоритмов для решения специализированных вычислительных задач; квантовые коммуникации — технологии защищенной передачи информации путем распределения криптографических ключей с использованием одиночных квантовых объектов; а также квантовая сенсорика — использование свойств квантовых систем для высокоточного измерения параметров окружающей среды.

Из приведенного анализа уровня готовности квантовых технологий видно, что квантовые вычисления находятся на достаточно ранней стадии, однако эффект от их внедрения прогнозируется как значительный. Следует отметить, что при разработке аппаратного обеспечения для квантовых вычислений («квантового железа») есть два основных направления: универсальные квантовые вычислительные устройства (т.е. устройства, которые могут

решать произвольные задачи) и специализированные квантовые вычислители (т.е. устройства, направленные на решение определенного класса задач). Квантовые вычислительные устройства характеризуются несколькими параметрами: размером квантового регистра (для универсального квантового компьютера — количество кубитов, являющихся элементарными информационными единицами квантовых вычислений, которые помимо состояний 0 и 1 могут быть в состоянии квантовой суперпозиции, т.е. «одновременно и 0, и 1»), качеством операций (точностью реализации квантовой операции или fidelity), а также спектром решаемых задач. Именно эффекту квантовых вычислений в первую очередь посвящен настоящий отчет.

Одним из приложений квантовых вычислений может стать решение оптимизационных задач, например, из области логистики. Речь может идти как о получении более качественного решения, так и об ускорении получения решения заданного уровня качества, т.е. ожидается выигрыш либо в качестве решения, либо во времени, либо в комбинации этих факторов².

Уровень готовности различных квантовых технологий



¹ Purohit, Abhishek & Kaur, Maninder & Seskir, Zeki & Posner, Matthew & Venegas-Gomez, Araceli. (2023). Building a quantum-ready ecosystem. IET Quantum Communication. 5. n/a-n/a. <https://arxiv.org/pdf/2304.06843>

² <https://www.nature.com/articles/s42254-024-00770-9>

Для решения широкого класса оптимизационных задач создаются специализированные квантовые вычислители, например, устройство квантового отжига канадской компании D-Wave Systems. Одним из недавно представленных приложений квантового отжига стало решение задач оптимизации работы порта путем лучшей интеграции перевозок контейнеров с прибывающими грузовиками и поездами³. Цель решения таких оптимизационных задач – снижение расходов.

Приложения квантовых вычислений в финансовой сфере также включают создание более эффективных методов анализа финансовых данных^{4,5}. Уже сегодня многие крупные банки, такие как JPMorgan Chase, проводят пилотные проекты по исследованиям применений квантовых вычислений для анализа рисков и создания более эффективных инструментов аналитики⁶.

Один из иллюстративных примеров потенциального экономического эффекта от квантовых вычислений – их применение в разработке новых лекарств. Разработка нового лекарства оценивается в 2 млрд долларов и занимает более 10 лет до выхода на рынок⁷. Квантовые вычисления позволяют эффективно моделировать молекулярные соединения с лекарственными свойствами, что позволяет более эффективно их тестировать, снижая количество экспериментальных тестов и ошибок.

Использование квантовых вычислений для задач моделирования химических соединений, очевидно, представляет интерес для промышленности. Например, прогнозируется возможность использования квантовых вычислений для разработки новых катализаторов⁸.

Квантовые вычисления – инструмент для решения задач, связанных с моделированием новых материалов. Одной из ключевых проблем на пути к созданию новых материалов является сложность их симуляции: материал представляет собой систему из большого количества сложным образом взаимодействующих квантовых систем (например, электронов). Точное решение столь сложных квантово-механических задач с использованием даже самых мощных суперкомпьютеров не представляется возможным. Квантовые вычислители могут позволить более эффективно моделировать квантовые системы, что дает основную информацию для анализа свойств соответствующих материалов⁹.

В эпоху бурного развития методов машинного обучения, решающих все более и более сложные задачи, в том числе из области моделирования сложных систем, таких как белки (за успехи в этом направлении в 2024 году была присуждена Нобелевская премия по химии Дэвиду Бейкеру, Демису Хассабису и Джону Джамперу) возникает вопрос о синергии

между методами искусственного интеллекта и квантовыми вычислениями. Эта синергия, безусловно, есть, однако имеет отношения к задачам специализированного класса. В случае использования квантового машинного обучения речь идет, например, о приготовлении выборок для более эффективного процесса обучения, а также ускорении отдельных элементов, связанных, например, с более эффективным решением систем линейных уравнений. Поэтому в ближайшем будущем можно прогнозировать появление новых подходов квантово-классического машинного обучения для изучения сложных систем, например, аккумуляторов и новых материалов¹⁰.

Нельзя обойти вниманием важный вопрос о роли квантовых вычислений для задач информационной безопасности. Квантовые вычислители несут угрозу широко распространенным методам криптографической защиты информации, например, таким алгоритмам с открытым ключом, как RSA. Стоит отметить, что реализация данной угрозы требует вычислительных возможностей квантовых компьютеров, которые находятся далеко за пределами ресурсов разработанных на сегодняшний день устройств. Однако эту угрозу не стоит недооценивать: необходим план-переход информационных систем на технологии квантового распределения ключей (квантовых коммуникаций) и постквантовых алгоритмов¹¹. В данный момент в России и в мире ведется работа по разработке, внедрению, стандартизации и сертификации решений для квантово-устойчивых решений защиты информации. Вопрос применения квантовых вычислений в криптографии, однако, не будет центральным в настоящем отчете.

Социальный эффект квантовых вычислений и их вклад в устойчивое развитие во многом связан с возможными применениями для задач прогнозирования климата и предсказания катаклизмов¹².

Таким образом, появление квантовых вычислений как новой парадигмы для решения сложнейших научных и промышленных задач имеет значительный потенциал для трансформации различных областей промышленности. В отчете The Quantum Insider прогнозируется, что к 2035 году экономический эффект от внедрения квантовых вычислений составит \$1 трлн.¹³. Ожидается, что к 2035 году доходы поставщиков квантовых вычислений составят \$50 млрд. По оценкам, к 2030 году квантовые вычисления создадут 250 000 новых рабочих мест, а к 2035 году – 840 000.

³ https://www.dwavesys.com/media/y3hl22va/dwave_port_of_la_case_story_v7.pdf

⁴ <https://www.mckinsey.com/capabilities/mckinsey-digital/our-insights/techforward/quantum-technology-use-cases-as-fuel-for-value-in-finance>

⁵ <https://www.nature.com/articles/s42254-023-00603-1>

⁶ <https://www.jpmorgan.com/technology/news/jpmorganchase-research-collaboration-shows-quantum-algorithm-speedup>

⁷ <https://ria.ru/20231019/lekarstva-1903832496.html>
jpmorganchase-qcware-evolve-hedging-for-a-quantum-future

⁸ <https://www.riverlane.com/blog/designing-better-catalysts-with-quantum-computers>

⁹ <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.chemrev.9b00829>

¹⁰ <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcclett.3c01703>

¹¹ <https://arxiv.org/abs/2304.04585>

¹² <https://www.copperpodip.com/post/quantum-computers-advancement-in-weather-forecasts-and-climate-change-mitigation>

¹³ <https://thequantuminsider.com/2024/09/13/the-quantum-insider-projects-1-trillion-in-economic-impact-from-quantum-computing-by-2035/>

В российской практике для уровня оценки готовности технологии используется шкала УГТ (уровня готовности технологии), которую можно применить для анализа текущего состояния развития квантовых и фотонных вычислений, а также решений на основе этих технологий для сферы новых материалов.

УГТ – уровень готовности технологии. Характеристика соответствия конкретной технологии уровню её зрелости от идеи до серийного производства (ГОСТ Р 58048 – 2017)

| | |
|--------------|---|
| УГТ 1 | Основные принципы технологии изучены и опубликованы |
| УГТ 2 | Концепция технологии и/или ее применения сформулированы |
| УГТ 3 | Критические функции и/или характеристики подтверждены аналитическим и экспериментальным путем |
| УГТ 4 | Компонент и/или макет испытаны в лабораторном окружении |
| УГТ 5 | Компонент и/или макет испытаны в окружении, близком к реальному |
| УГТ 6 | Модель или прототип продемонстрированы в окружении, близком к реальному |
| УГТ 7 | Прототип системы продемонстрирован в условиях эксплуатации |
| УГТ 8 | Реальная система завершена и квалифицирована в ходе испытаний и демонстрации |
| УГТ 9 | Реальная система подтверждена путем успешной эксплуатации |

Основным применением квантовых вычислений при разработке новых материалов является более эффективное квантово-химическое моделирование: квантово-химические модели лежат в основе методов изучения новых материалов и их свойств, поэтому чем точнее может быть просчитана структура материала на квантовом уровне, тем более точно можно предсказать возможные свойства (анализ свойств материалов), а также управлять ими (дизайн материалов).

Уровень готовности квантовых вычислений для разработки новых материалов можно оценить исходя из уровня готовности программных библиотек квантово-химического анализа, использующих квантовые вычисления в качестве инструмента и исследований, проводимых с их помощью. Библиотеки и методы различных участников рынка готовы и могут быть использованы для задач малой размерности¹ (моделирование десятков элементов с помощью тысяч кубит). Например, компания D-Wave провела расчеты спинового стекла с размерностью 5000 элементов уже в 2023 году. Однако такая технология представляет в первую очередь научный интерес. Так как тематика самих новых материалов² относительно новая, такие задачи решаются пока выборочно и в основном в исследовательских целях. Для лидирующих мировых центров – УГТ-3. В России разработана библиотека квантовой химии с использованием квантовых вычислений в Российском квантовом центре, которая применялась для решения прототипов прикладных химических задач в интересах индустриальных заказчиков (что можно оценить как УГТ-2).

Для Сбера новые материалы в будущем могут быть полезны в различных направлениях технологического развития. Например, для реализации физических компонентов вычислительной инфраструктуры, робототехники, устройств интернета вещей, носимой электроники и т.д.

Кроме того, стоит отметить, что Сбер в 2024 году запустил международное исследование рынка зеленых технологий по 12 ключевым направлениям, куда также входят новые материалы и планирует предложить модели искусственного интеллекта для зеленых технологий. Исследование и анализ экологических материалов для зеленых технологий, например, зеленой энергетики с использованием квантовых вычислений и машинного обучения может стать вкладом в устойчивое развитие³.

В наибольшей степени новые материалы и квантовые вычисления для новых материалов могут быть полезны технологическим компаниям в периметре экосистемы Сбера и для партнеров – представителей различных направлений промышленности. Также целесообразно рассмотреть создание специализированных цифровых сервисов по предоставлению услуг расчета новых материалов с использованием квантовых вычислений и методов машинного обучения.

¹ Ma, H., Liu, J., Shang, H., Fan, Y., Li, Z., & Yang, J. (2023). Multiscale quantum algorithms for quantum chemistry. *Chemical science*, 14(12), 3190–3205. <https://doi.org/10.1039/d2sc06875c>
<https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2023/sc/d2sc06875c>

² King, A.D., Raymond, J., Lanting, T. et al. Quantum critical dynamics in a 5,000-qubit programmable spin glass. *Nature* 617, 61–66 (2023). <https://doi.org/10.1038/s41586-023-05867-2> <https://arxiv.org/pdf/2207.13800>

³ <https://www.sbergaem-vmeste.ru/news/sber-issleduet-rinok-zelyonih-tehnologii-po-12-napravleniyam>

Оценки уровня готовности квантовых технологий

| | УГТ | |
|--|------------|----------|
| | В РФ | В мире |
| Квантовые вычисления | | |
| Квантовый отжиг | | |
| Устройство квантового отжига на сверхпроводниках | 1 | 7-8 |
| Универсальный цифровой квантовый компьютер | | |
| Сверхпроводники | 3 | 5-6 |
| Нейтральные атомы | 3 | 4-5 |
| Фотоны | 3 | 4-5 |
| Ионы | 4 | 4-5 |
| Облачные платформы квантовых вычислений | 4-5 | 9 |
| Квантовые языки программирования | 1 | 6-7 |
| Квантовые алгоритмы | 6-7 | 6-7 |
| Эмуляторы квантового компьютера | 6-7 | 6-7 |
| Аппаратно-ускоренные эмуляторы квантового компьютера | 1-2 | 3-4 |
| Фотонные вычисления | | |
| Фотонный классический компьютер | 2-3 | 4 |
| Квантовые сенсоры | | |
| Квантовые фотодетекторы | 5-9 | 9 |
| Атомные и ионные часы | 3-7 | 7 |
| Оптические частотные гребенки | 4 | 4 |
| Квантовые коммуникации | | |
| Квантовое распределение ключей | 8 | 8 |
| Квантовые генераторы случайных чисел | 8 | 8 |
| Постквантовая криптография | 7-8 | 8 |
| Новые материалы в квантовых технологиях | | |
| Двумерные материалы | 3 | 4-5 |
| Квантовые точки | 3 | 4 |
| Спины | 2 | 3-4 |
| Структуры с майорановскими фермионами | 1 | 2 |
| Поляритоны | 2-3 | 2 |
| Топологические изоляторы | 2 | 3 |
| NV-центры в алмазе | 2-3 | 2-3 |
| Полуметаллы Вейля и Дирака | 1 | 1 |

Рынок квантовых технологий и новых материалов в РФ

Прогнозируемый объем рынка квантовых вычислений

Прогнозируемый объем **мирового рынка** квантовых вычислений к 2040 году варьируется в диапазоне от \$45 до \$131 млрд¹.

Прогноз рынка от Boston Consulting Group²

| | NISQ этап | Этап квантового вычислительного преимущества | Этап полномасштабной коррекции ошибок |
|--|-------------|--|---------------------------------------|
| Суммарный ежегодный экономический эффект для конечных пользователей | \$5-10 млрд | \$80-170 млрд | \$450-850 млрд |
| Суммарный ежегодный доход для поставщиков решений на основе квантовых вычислений | \$1-2 млрд | \$15-30 млрд | \$90-170 млрд |

NISQ (noisy intermediate-scale quantum) — этап развития квантовых вычислений, характеризующийся квантовыми процессорами, содержащими до 1000 кубитов, работающих с ошибками, эффект которых оказывает значительное влияние на результаты вычислений, т.е. разрабатываются шумные квантовые процессоры³ промежуточного масштаба. Такие NISQ-устройства уже сегодня демонстрируют квантовое вычислительное преимущество — решение задач многократно быстрее лучших в мире суперкомпьютеров. Например, в 2024 году компания Google с использованием квантового процессора Willow с 105 кубитами показала решение за 5 минут синтетической задачи, на которую суперкомпьютеру потребовалось бы время, сопоставимое со временем жизни Вселенной⁴.

Эффект ошибок может быть снижен за счет их смягчения или подавления⁵ — это одна из ключевых траекторий развития NISQ-устройств. Ожидается, что это позволит решать первые полезные задачи с преимуществом относительно классических методов (этап квантового вычислительного преимущества).

Снижение уровня ошибок ниже определенного порога позволит применять коды коррекции ошибок, что сделает квантовые компьютеры устойчивыми (этап полномасштабной коррекции ошибок). Квантовые компьютеры с коррекцией ошибок откроют путь к решению сложнейших вычислительных задач и масштабируемым применениям квантовых вычислений в промышленности.

Прогнозируемый объем рынка квантовых вычислений в **России** к 2040 году варьируется в диапазоне от 110 до 258 млрд руб⁶.

¹ McKinsey Digital. Quantum Technology Monitor. April 2024. <https://www.mckinsey.com/capabilities/mckinsey-digital/our-insights/steady-progress-in-approaching-the-quantum-advantage#/>

² BCG. The Long-Term Forecast for Quantum Computing Still Looks Bright. July 2024 <https://www.bcg.com/publications/2024/long-term-forecast-for-quantum-computing-still-looks-bright>

³ <https://arxiv.org/pdf/1801.00862>

⁴ <https://www.nytimes.com/2024/12/09/technology/google-quantum-computing.html>

⁵ <https://www.ibm.com/quantum/blog/gammarbar-for-quantum-advantage>

⁶ Исследование «Рексофт Консалтинг»: «Квантовые вычисления: взгляд в будущее» <https://www.reksoft.ru/blog/2024/10/17/quantum-computing-research/>

Дорожная карта развития высокотехнологичной области «Квантовые вычисления»

В 2019 году между Правительством Российской Федерации и Госкорпорацией «Росатом» заключено соглашение о намерениях в целях развития высокотехнологичного направления «Квантовые вычисления». Основным механизмом исполнения соглашения является дорожная карта развития высокотехнологичной области «Квантовые вычисления» на период до 2030 года.

В рамках Дорожной карты к работе над квантовыми процессорами и квантовым программным обеспечением привлечены ведущие научные группы из университетов и исследовательских центров. В связи с тем, что на сегодняшний день нет однозначного ответа относительно того, какая платформа по квантовым вычислениям станет лидером, в рамках Дорожной карты ведутся исследования и разработки по всем приоритетным платформам — сверхпроводникам, атомам, ионам и фотонам, а также по перспективным направлениям.

Также в Дорожной карте ведется работа над квантовыми алгоритмами и программным обеспечением. В частности,

разрабатывается облачная платформа для удаленного доступа к квантовым вычислителям, которая позволяет запускать различные квантовые алгоритмы. Пользователями могут быть представители различных организаций, заинтересованных в проведении экспериментов и исследовании возможностей квантовых процессоров для решения практических задач.

Ключевым результатом Дорожной карты периода 2020-2024 гг. стала демонстрация в 2024 году работы двух прототипов 50-кубитных квантовых компьютеров, созданных при поддержке Правительства Российской Федерации и Госкорпорации «Росатом»: 50-кубитный квантовый компьютер на основе ионов в ловушках, созданный учёными Российского квантового центра на базе лаборатории ФИАН им. П.Н. Лебедева РАН и 50-кубитный квантовый компьютер на основе нейтральных атомов, созданный учёными Российского квантового центра на базе лаборатории Центра квантовых технологий МГУ им. М.В. Ломоносова.

Развитие квантовых технологий в России при поддержке Росатома

Комментарии экспертов



Екатерина Борисовна Солнцева

Директор по цифровизации
Госкорпорации «Росатом»

С 2020 года в рамках федерального проекта «Цифровые технологии» национальной программы «Цифровая экономика Российской Федерации» и в соответствии с соглашением, заключенным с Правительством Российской Федерации, Госкорпорация «Росатом» реализует дорожную карту высокотехнологичной области «Квантовые вычисления».

С использованием разработанного в рамках Дорожной карты программного обеспечения уже реализуется Программа внедрения квантовых вычислений в атомной отрасли, в том числе квантовых алгоритмов, в рамках которой ведутся пилотные проекты, направленные на оптимизацию процессов в производстве и управлении, определяется спектр конкретных задач для решения с помощью квантовых вычислений. За 2024 год по ряду проектов получены первые результаты, позволяющие говорить о перспективности, потенциальной полезности и применимости квантовых вычислений для решения практических отраслевых задач. В 2025 г. предполагается их апробация на модельных задачах. В качестве первого результата ожидается появление проектов по внедрению продуктов и сервисов квантовых вычислений для решения

модельных задач в атомной отрасли. С 2026 года планируется начало постепенного перехода от решения модельных задач к практическим, а после 2030 года планируется представить эффекты от применения квантовых вычислений в решении производственных задач в атомной отрасли.

Текущие вопросы — определение спектра задач, которые приоритетно будут решаться с помощью технологии квантовых вычислений. В настоящее время можно говорить о промежуточных результатах решения модельных задач — «упрощенных» практических задач отрасли, помогающих понять, где, как, с какими эффектами и потенциалом наиболее перспективно применять технологию квантовых вычислений. Это задачи, например, в области решения систем линейных уравнений в задачах теплопереноса, математического (имитационного) моделирования физических процессов, происходящих в отдельных деталях.

На горизонте 2027-2033 гг. квантовые компьютеры, с большой вероятностью, начнут соревноваться с классическими в решении реальных промышленных задач. Наиболее приоритетными станут: маршрутизация

транспорта и логистика, оптимизация загрузки воздушных и морских судов, торговых систем, улучшение пропускных способностей линий данных, машинное обучение, квантово-химическое моделирование, поиск и семплирование.

В 2033-2035 гг. можно ожидать наступления эры полезного квантового преимущества, когда квантовые компьютеры прочно займут свою нишу в вычислительной инфраструктуре.

Кроме того, в настоящее время в связи с ограниченной доступностью квантовых компьютеров и возрастающим интересом к квантовым вычислениям в рамках Дорожной карты разработаны и созданы программные эмуляторы квантовых процессоров с возможностью моделирования поведения реальных систем до 30 кубит. Данные эмуляторы используются для разработки и верификации квантовых алгоритмов, позволяющих решать различные задачи, в том числе из области физики твердого тела, разработки новых материалов, оптимизации процессов. С 2025 года планируется не только расширение линейки доступных квантовых вычислителей, но и разработка методов приближенной эмуляции квантовых процессоров с поддержкой сложных систем свыше 100 кубит. Это позволит протестировать и провести реальную апробацию разрабатываемых прикладных квантовых алгоритмов и получить практически значимые результаты.

Госкорпорация «Росатом» совместно с научно-технологическими партнерами проводит пилотные проекты и исследовательские работы по использованию квантовых вычислений для задач химии и проектирования новых материалов. Работы проводятся в Российском квантовом центре (далее – РКЦ).

В частности, на стыке задач квантовой оптимизации, машинного обучения и генеративной химии в РКЦ разработан новый квантовый алгоритм для задач вычислительной химии и поиска новых лекарств. Он основан на модификации классической архитектуры нейронной сети типа автокодировщика. Обучаемость такой модели была верифицирована на обучающей выборке в базе биологически активных соединений (ChEMBL), содержащей текстовые описания молекул, имеющих лекарственные свойства¹. В результате обучения нейросеть смогла генерировать новые молекулы, отсутствующие в исходном датасете, но примерно соответствующие им по некоторым ключевым характеристикам. Модель применена для предсказания новых потенциально синтезируемых лекарственных веществ.

Кроме того, в РКЦ разрабатывается библиотека для квантово-химического моделирования, чьей основной целью является ускорение разработки вариационных квантовых алгоритмов для задач расчета электронной структуры². Библиотека облегчает интеграцию классических и квантовых алгоритмов для гибридных вычислений и помогает реализовать перекрестную проверку данных с традиционными вычислительными методами, тем самым повышая общую надежность моделирования квантовой химии. На данный момент возможны расчеты основного и возбужденного состояний небольших электронных систем, что позволяет моделировать динамику поведения химических систем в различных условиях.

Госкорпорация «Росатом» проводит системную работу по вовлечению индустрии и образовательных организаций в проекты по квантовым вычислениям.

Ключевые характеристики приоритетных платформ реализации квантовых вычислений

| Платформы | Преимущества | Недостатки |
|---------------------------|---|--|
| Сверхпроводниковая | Промышленная технология для производства | Необходимость использования сверхнизких температур Сложность создания идентичных сверхпроводниковых кубитов |
| Ионная | Наилучшие показатели стабильности и точности выполнения кубитных операций | Сложность масштабирования – увеличение количества ионов усложняет контроль |
| Атомная | Эффективное масштабирование | Высокая сложность управления кубитами, т.е. сложность достижения высокой точности операций |
| Фотонная | Хорошо отлаженная КМОП-совместимая технология Возможность работы при комнатных температурах Отсутствие декогеренции (ошибок) в привычном смысле | Сложность реализации операций из-за отсутствия физического взаимодействия между фотонами Сложность подбора материалов |

¹ <https://www.nature.com/articles/s41598-023-32703-4>

² <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/2701/1/012032/meta>

В 2023 году в рамках реализации Дорожной карты проведены успешные испытания квантовых компьютеров:

- 25-кубитный на основе нейтральных атомов;
- 20-кубитный на основе ионов в ловушках³;
- 10-кубитный на основе фотонных чипов;
- 8-кубитный на основе сверхпроводников⁴.

В 2024 году в рамках Дорожной карты созданы первый российский 50-кубитный ионный квантовый компьютер⁵ и 50-кубитный компьютер на нейтральных атомах⁶⁻⁷.

На данный момент Россия входит в число шести стран, имеющих квантовые компьютеры с 50 кубитами и более, и в число трех стран, наряду с США и Китаем, с квантовыми компьютерами на четырех основных платформах, считающихся в мире приоритетными для квантовых вычислителей (сверхпроводники, ионы, нейтральные атомы и фотоны).

Над общими задачами Дорожной карты работают ведущие российские университеты и академические институты. Экспертную поддержку проекту оказывает Российская академия наук⁸.

Лидеры международного рынка квантовых вычислений⁹

| Платформа | Страна разработчика | Компания разработчика | Количество кубит |
|--|---------------------|--|---------------------|
| Сверхпроводниковая | США | IBM | 1121 |
| | Китай | USTC | 504 |
| | Россия | В рамках реализации «Дорожной карты» Госкорпорации «Росатом», по результатам 2023 года МГТУ им. Н.Э. Баумана и ФГУП «ВНИИА им. Н.Л. Духова» | 8 ⁴ 4 |
| Ионная | США | Quantinuum | 56 |
| | Россия | В рамках реализации «Дорожной карты» Госкорпорации «Росатом», по результатам 2023 года | 203 |
| | США | IonQ | 32 |
| Нейтральные атомы | США | Atom Computing | 1180 |
| | | QuEra | 256 |
| | Россия | В рамках реализации «Дорожной карты» Госкорпорации «Росатом», по результатам 2023 года | 25 |
| Фотонная | Китай | USTC | 255 |
| | Канада | Xanadu | 216 |
| | Россия | В рамках реализации «Дорожной карты» Госкорпорации «Росатом», по результатам 2023 года | 10 |
| | Франция | Quandela | 5 |
| Полупроводники | США | Intel | 12 |
| | Нидерланды | QuTech | 6 |
| | Финляндия | SemiQuon | 4 |
| | Австралия | SQC | 4 |
| Квантовые симуляторы и квантово-вдохновлённые решатели | Канада | D-Wave | 5000 |
| | Япония | NTT | 2048 |
| | Россия | В рамках реализации «Дорожной карты» Госкорпорации «Росатом», по результатам 2023 года | 387 |

³ <https://tass.ru/interviews/20045331>

⁴ <https://misis.ru/news/8851/>

⁵ <https://nauka.tass.ru/nauka/21937207>

⁶ <https://www.rosatom.ru/journalist/smi-about-industry/uchenye-predstavili-1-y-v-rf-50-kubitnyy-kvantovyy-kompyuter-na-kholodnykh-atomakh/>

⁷ https://www.rqc.ru/article/MSU_RQC_50_qubit_neutral_atoms

⁸ <https://new.ras.ru/activities/news/prezident-ran-gennadiy-krasnikov-provyel-sessiyu-po-50-kubitnomu-kvantovomu-vychislitelju-na-ionnoy-/>

⁹ <https://quantumcomputingreport.com/qubit-count/>

Фотонная платформа квантовых вычислений в 2024 году

Комментарии экспертов



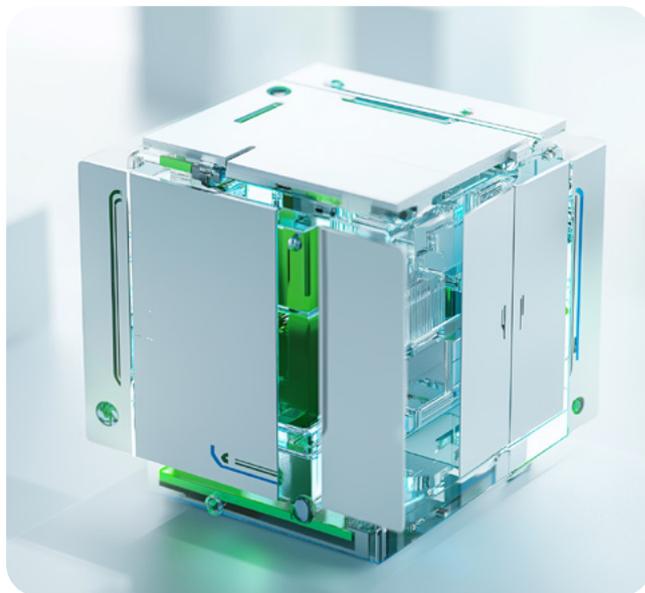
**Станислав
Страупе**

Научный руководитель
центра квантовых
технологий Сбера

Фотоника стоит особняком среди всех основных платформ квантовых вычислений — в чисто оптических системах нет большинства процессов декогеренции, присущих системам с «материальными» кубитами. Кроме того, при построении оптических квантовых вычислителей можно опираться на развитые технологии интегральной фотоники и использовать весь потенциал, накопленный производителями чиплетов для телекоммуникационной индустрии. Тем не менее, квантовая фотоника предъявляет значительно более жёсткие требования к интегральной технологии, особенно в отношении оптических потерь в волноводах, ведь в этой области в прямом смысле слова каждый фотон имеет значение.

Дальше всех в создании масштабируемой технологии со сверхнизкими потерями подошла американская компания **PsiQuantum**, использующая уникальную интегрально-оптическую платформу на основе гибридной интеграции структур из нитрида кремния и титаната бария — нового перспективного материала для быстрых электрооптических переключателей. В 2024 году после многолетней работы в стелс-режиме компания наконец опубликовала¹ первую работу с экспериментальными данными, позволяющую судить о достигнутом техническом уровне. И эти данные впечатляют — достигнута точность приготовления-измерения квантовых состояний $99.98\pm 0.01\%$, видность двухфотонной интерференции от различных источников $99.50\pm 0.25\%$; точность двухкубитного гейта слияния $99.22\pm 0.12\%$. Эти показатели уже вплотную приближаются к пороговым значениям, достижение которых позволит реализовать коррекцию ошибок, связанных с потерями фотонов. Предвосхищая этот технологический прорыв, компания также анонсировала² ПО с открытым кодом Bratiq и QREF для оценки ресурсов, необходимых на выполнение квантовых алгоритмов в устойчивой к ошибкам фотонной архитектуре.

Европейские конкуренты PsiQuantum в этом году были не менее активны. Сразу два стартапа — французский **Quandela** и голландский **QUIX** открыли облачный доступ к своим фотонным вычислителям. Платформа, созданная QUIX в партнёрстве с QMware³, позволяет воспользоваться системой, имеющей до 4 фотонов в 20-модовом интерферометре и до 20 детекторов: характеристики пока скорее для демонстрационных исследовательских экспериментов. Аналогичная система от Quandela⁴ позволяет использовать уже до 10 фотонов: источники фотонов на полупроводниковых квантовых точках — ключевая технологическая компетенция стартапа. Quandela также разработала собственную программную платформу⁵ для моделирования оптических квантовых компьютеров.



¹ <https://arxiv.org/abs/2404.17570>

² <https://thequantuminsider.com/2024/05/09/psiquantum-announces-open-source-software-for-better-tools-libraries-and-datasets/>

³ <https://www.quixquantum.com/news/bia-launch>

⁴ <https://www.quandela.com/cloud/>

⁵ <https://www.quandela.com/perceval/>

Большое внимание привлёк к себе стартап **Photonic Inc**, разрабатывающий⁶ технологию оптических соединений между спиновыми кубитами в кремнии, что потенциально может значительно упростить масштабирование одной из наиболее перспективных платформ твердотельных кубитов.

Несколько значительных результатов было продемонстрировано и ведущими академическими научными группами. Так группа **Андреаса Вальрафа (A. Wallraff) в ETH** продемонстрировала⁷ приготовление 20-кубитных кластерных состояний для фотонов на частотах ~5 ГГц.

В СВЧ диапазоне, в отличие от оптического, можно добиться очень сильного взаимодействия фотонов со сверхпроводящими кубитами и использовать это для создания сильной нелинейности. Несмотря на значительные трудности, связанные с необходимостью работать при милликельвиновых температурах, полученные результаты выглядят многообещающими.

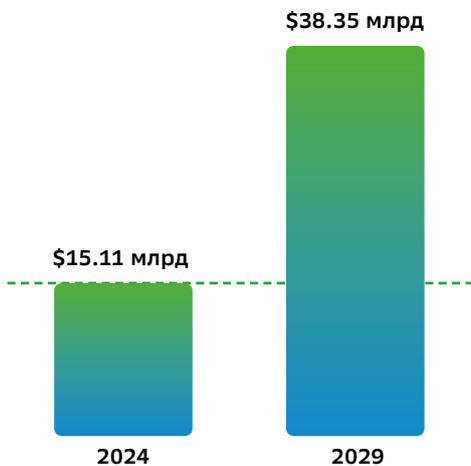
Группа **А. Фурусава** опубликовала⁸ работу, в которой решена проблема создания так называемого GKP кубита — основного ресурса для коррекции ошибок в оптических квантовых вычислителях, кодирующих информацию не в одиночных фотонах, а в квантовые состояния сжатого света. Коллектив планирует запуск⁹ стартапа OptQC¹⁰ для коммерциализации своей технологии. Эту же технологию использует, например, известный канадский стартап **Xanadu**. Что касается однофотонных источников, то здесь сильными результатами может похвастаться китайская группа под руководством **Пань Цзяньвэя (J.W. Pan)** — они создали¹¹ источник одиночных фотонов на квантовых точках с рекордной эффективностью более 70%, что позволило им зарегистрировать 40-фотонные события, более чем вдвое улучшив показатели, достигнутые в бозонном сэмплере с одиночными фотонами.

Отметим, что бозонные сэмплеры, использующие яркий сжатый свет, например, китайский Jiuzhang 3.0¹² по-прежнему остаются системами, наиболее уверенно демонстрирующими квантовое превосходство, оставаясь далеко за пределами возможностей моделирования на классических суперкомпьютерах.

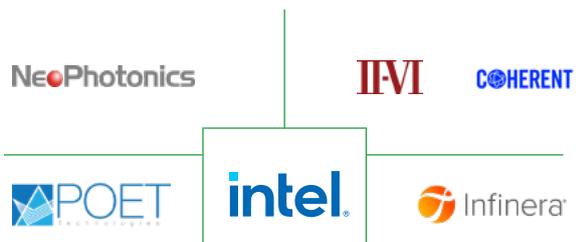
Основные тенденции и прогноз глобального рынка фотонных интегральных схем

Рынок фотонных интегральных схем

Объём рынка в миллиардах долларов¹³
Совокупный среднегодовой темп роста 20.47%



| | |
|----------------------------|-------------------------------|
| Период исследования | 2019 – 2029 |
| Объём рынка (2024) | \$15,11 млрд |
| Объём рынка (2029) | \$38,35 млрд |
| CARG (2024-2029) | 20,47 % |
| Самый быстрорастущий рынок | Азиатско-Тихоокеанский регион |
| Крупнейший рынок | Азиатско-Тихоокеанский регион |
| Основные игроки | |



Основные игроки отсортированы в произвольном порядке

⁶ <https://thequantuminsider.com/2024/05/30/photonic-demonstrates-distributed-entanglement-between-modules-significant-step-toward-scalable-quantum-computing-and-networking/>

⁷ <https://arxiv.org/abs/2409.06623>

⁸ <https://www.science.org/doi/10.1126/science.adk7560>

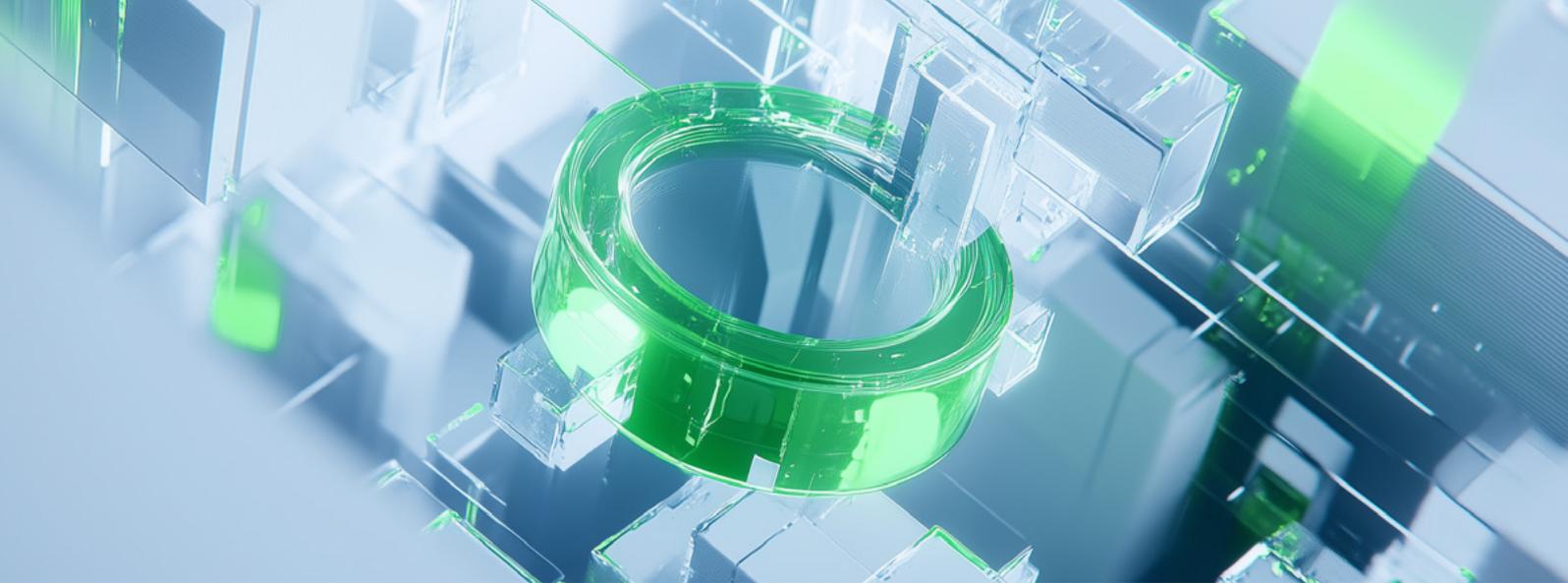
⁹ <https://sj.jst.go.jp/news/202403/n0301-02k.html>

¹⁰ <https://www.optqc.com/>

¹¹ <https://arxiv.org/abs/2311.08347>

¹² <https://arxiv.org/abs/2304.12240>

¹³ <https://www.mordorintelligence.com/industry-reports/hybrid-photonic-integrated-circuit-market>



Инвестиционный ландшафт квантовых технологий

Согласно отчету McKinsey, прогнозируется рост объема рынка квантовых вычислений с \$9 млрд в 2023 году до \$72 млрд и более \$130 млрд к 2040 году в оптимистичном сценарии, что соответствует темпу роста около 17%.

Одним из основных источников инвестиций в квантовые технологии в мире является государство. Так, суммарный объем частных венчурных инвестиций в стартапы квантовых технологий в 2023 году, по данным McKinsey, составил \$1,7 млрд¹, тогда как объем государственных инвестиций составляет \$4 - 5 млрд² в год.

Согласно данным отчета State Quantum 2024² и The Quantum Insider Intelligence Platform³, национальные правительства планируют потратить от \$40 до \$50 млрд на развитие квантовых технологий в ближайшие 10 лет.

Примеры анонсированных бюджетов стран на развитие квантовых технологий на основе открытых источников:⁴

- Китай – \$15 млрд (на 5 лет)
- Великобритания – \$4,3 млрд (на 5 лет)
- США – \$3,75 млрд (на 5 лет)
- Германия – \$3,3 млрд (на 8 лет)
- Южная Корея – \$2,35 млрд (на 12 лет)
- Россия – 24 млрд руб. (на 4 года)

Примеры крупнейших компаний в области квантовых вычислений, которые получают государственные инвестиции:

- Стартап из Торонто Xanadu получил \$40 млн⁵ от канадского правительства в 2023 году.
- В июле 2023 года компания Silicon Quantum Computing (SQC) закрыла раунд на \$50,4 млн⁶, в числе основных инвесторов было австралийское правительство.
- Британский государственный фонд National Security Strategic Investment Fund (NSSIF), занимающийся передовыми технологиями двойного назначения проинвестировал⁷ \$2,5 млн в Oxford Ionics⁸, занимающийся разработкой квантовых компьютеров.

¹ <https://www.mckinsey.com/featured-insights/sustainable-inclusive-growth/charts/quantum-technologies-investment-slump>

² https://uploads-ssl.webflow.com/6523f13a748909d3e1bbb657/65e6d35be62d08db2e7b3b71_State-of-Quantum-2024-report.pdf

³ <https://thequantuminsider.com/2023/02/28/top-quantum-spenders-based-on-gdp-list-offers-surprising-changes-in-leadership-status/>

⁴ <https://www.qureca.com/overview-of-quantum-initiatives-worldwide-2023/>

⁵ <https://thequantuminsider.com/2023/01/23/canada-invests-40-million-in-xanadu-quantum-technologies/>

⁶ <https://sqc.com.au/2023/07/25/silicon-quantum-computing-raises-50-4m/>

⁷ <https://quantumcomputingreport.com/oxford-ionics-raises-an-additional-2-million-2-5m-usd-from-the-uks-national-security-strategic-investment-fund-nssif/>

⁸ <https://www.oxionics.com/>

Наиболее яркие инвестиционные сделки индустрии квантовых вычислений в 2023-2024 годах

| 2024 | Сумма сделки | Всего инвестиций |
|-------------------------------|--------------------------|------------------|
| PsiQuantum | \$617 млн ⁹ | \$853 млн |
| Quantinuum | \$300 млн ¹⁰ | \$325 млн |
| Planqс | \$54 млн ¹¹ | \$54 млн |
| Multiverse Computing | \$27 млн ¹² | \$40,5 млн |
| Diraq | \$22 млн ¹³ | — |
| C12 | \$20 млн ¹⁴ | \$29,7 млн |
| Huayi Boao Quantum Technology | \$13,9 млн ¹⁵ | — |
| QpiAI | \$6,5 млн ¹⁶ | \$11,3 млн |
| 2023 | | |
| Pascal | \$111 млн ¹⁷ | — |
| Oxford Quantum Circuits | \$100 млн ¹⁸ | \$150 млн |
| Photonic Inc | \$100 млн ¹⁹ | \$140 млн |
| Silicon Quantum Computing | \$50,4 млн ²⁰ | \$133 млн |
| Quantum Motion | \$50 млн ²¹ | \$75 млн |
| Optalysys | \$27,5 млн ²² | \$32,1 млн |
| Q-Ctrl | \$27,4 млн ²³ | \$74 млн |
| Strangeworks | \$24 млн ²⁴ | \$28 млн |
| Quobly | \$21 млн ²⁵ | — |
| Quantum Brilliance | \$18 млн ²⁶ | \$27,7 млн |
| TuringQuantum | >\$15 млн ²⁷ | — |
| Algorithmiq | \$15 млн ²⁸ | — |
| Quantware | \$6,33 млн ²⁹ | \$7,51 млн |
| Planckian | \$3 млн ³⁰ | — |
| Oxford Ionics | \$2,5 млн ³¹ | — |

⁹ <https://www.iotworldtoday.com/quantum/australia-invests-617m-for-useful-quantum-computer>

¹⁰ <https://quantumcomputingreport.com/quantinuum-announces-a-300-million-equity-investment/>

¹¹ https://www.photonics.com/Articles/Quantum_Startup_planqc_Raises_54M/a70131

¹² <https://techcrunch.com/2024/03/04/multiverse-computing/>

¹³ <https://diraq.com/newsdesk/diraq-adds-leading-deeptech-and-venture-investors-to-usd-22-million-investment-round>

¹⁴ <https://www.c12qe.com/articles/c12-raises-18-million-euros-to-accelerate-the-development-of-quantum-computing-with-its-unique-approach>

¹⁵ https://finance.yahoo.com/news/q1-2024-quantum-computing-related-013706692.html?guce_referrer=aHR0cHM6Ly93d3cuZ29vZ2xLLmNvbS8&guce_referrer_sig=AQAAAIKU_yV04nVDHG7aQxPkcUoFVyeHxPhiE3ynw9Ur-gsEtrFWJcciu3TztPsPoM8KGu7he1seFP0bKq68yMS8Rs9dJOEQ8Fsd3Kaa_hz_H11yZCNMn3_I_HINNHILKNvZBSbZn87pXP1ZPsDXj3Iu89dgnri0wbHuMKOKsz4TetG&guccounter=2

¹⁶ <https://www.cnbctv18.com/business/startup/qpiAI-raises-over-dollar-6-million-in-pre-series-a-funding-your-nest-sidbi-19431976.htm>

¹⁷ <https://sifted.eu/articles/pasqal-biggest-quantum-round>

¹⁸ <https://www.ipgroupplc.com/news-and-events/portfolio-news/2023/2023-11-27#:~:text=LONDON%2C%20UK%20E2%80%93%20November%2027%2C,leading%20QC's%20%24100m%20round.>

¹⁹ <https://photonics.com/news/photonics-raises-100m-for-quantum-technology/>

²⁰ <https://sqc.com.au/2023/07/25/silicon-quantum-computing-raises-50-4m/#:~:text=Sydney%2C%20Australia%20E2%80%93%2024%20July%20>

2023,scalable%2C%20error%20corrected%20quantum%20computer.

²¹ <https://quantummotion.tech/quantum-motion-raises-42-million-investment-round/>

²² https://tracxn.com/d/companies/optalysys/_dOH6qn164diCAMRFb2uuXKE_5EL15ZkzN_VR85PNwE

²³ <https://q-ctrl.com/blog/q-ctrl-announces-expansion-of-industry-leading-series-b-for-quantum-infrastructure-software>

²⁴ <https://strangeworks.com/press/strangeworks-success-drives-ecosystem-expansion-24m-series-a#:~:text=AUSTIN%2C%20TX%20March%2021%2C%202023,debut%20at%20SXSW%20in%202018.>

²⁵ <https://www.quantonation.com/2023/07/13/quobly-former-siquance-raises-e19m-led-by-quantonation-bpifrance/>

²⁶ https://tracxn.com/d/companies/quantum-brilliance/_XyD1egy5HLXzm9HgmC1iAtVuldx4RDxcLD43X1t2ng/funding-and-investors

²⁷ <https://semiengineering.com/startup-funding-january-2023/>

²⁸ <https://thequantuminsider.com/2023/06/27/quantum-scaleup-algorithmiq-raises-15m-series-a-to-accelerate-drug-discovery-work-with-global-pharma-companies/>

²⁹ https://tracxn.com/d/companies/quantware/_j95cm4RR4uHx7-7VaGH85YqnH8I2xPVdimeS2xcpp2A/funding-and-investors

³⁰ <https://thequantuminsider.com/2023/06/28/planckian-raises-over-e-2-7-million-to-develop-quantum-batteries/>

³¹ <https://quantumcomputingreport.com/oxford-ionics-raises-an-additional-2-million-2-5m-usd-from-the-uks-national-security-strategic-investment-fund-nssif/>

Яркие примеры слияний и поглощений, связанные с квантовым материаловедением и материалами для квантовых вычислений

- Американская компания **SandboxAQ** приобрела¹ Good Chemistry, спин-офф канадского стартапа 1QBit в области квантовых вычислений. Good Chemistry специализируется на вычислительной химии, используя искусственный интеллект и квантовые технологии для ускорения процесса разработки новых материалов. Сумма сделки, по оценкам различных источников, составила \$75 млн. Сама компания SandboxAQ является частью Alphabet (материнская компания Google), занимающегося квантовыми технологиями.
- Компания в области квантовых вычислений **ORCA Computing** объявила о покупке подразделения интегральной фотоники американской компании GXC. Это подразделение занимается гибридными фотонными материалами и поставляет решения ведущим коммерческим и государственным организациям США, включая Агентство перспективных исследовательских проектов Министерства обороны США (DARPA). Данная сделка позволит ORCA Computing в будущем стать лидером по поставке мощных масштабируемых квантовых компьютеров.
- **Infleqtion**, компания-лидер в области квантовых вычислений, приобрела² две компании по производству компонентов для квантовых технологий: SiNoptiq Inc. и Morton Photonics Inc. Это позволит Infleqtion ускорить реализацию планов по интеграции лазеров, фотонных и атомных систем на уровне микросхем, что имеет важное значение для коммерциализации квантовых продуктов, таких как датчики и квантовые компьютеры.

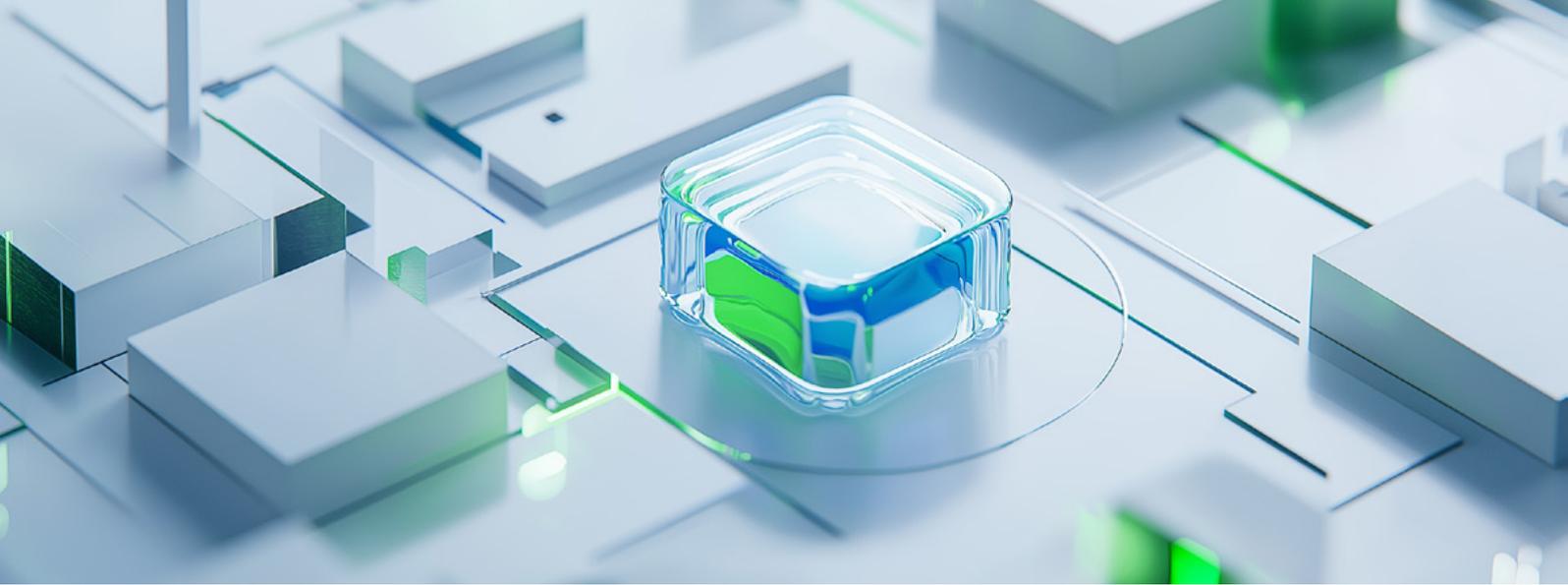


¹ <https://thequantuminsider.com/2024/01/09/sandboxaq-acquisition-has-good-chemistry-teams-say-move-could-accelerate-drug-development-and-material-innovation/>

² <https://www.prnewswire.com/news-releases/infleqtion-accelerates-commercialization-of-quantum-products-at-scale-with-silicon-photonics-acquisitions-302046294.html>



Принципы
квантовых вычислений



Принципы квантовых вычислений

Требования к физическим системам, которые могут стать основой для квантовых компьютеров

Требования к физическим системам, которые могут стать основой для квантовых компьютеров были сформулированы Д. ДиВинченцо¹:

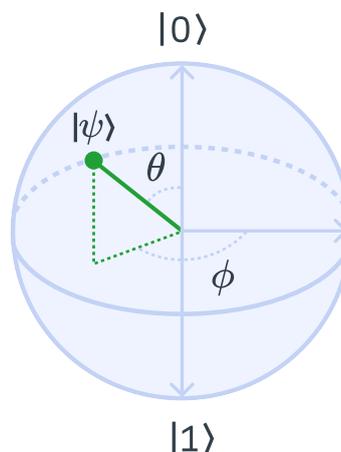
1. Необходимо иметь масштабируемую физическую систему. Это означает возможность создать систему из большого числа адресуемых идентичных кубитов. Количество кубитов определяет предельные возможности квантового компьютера с точки зрения размера решаемой задачи.
2. Возможность инициализировать любое начальное состояние кубитов. На практике начальным состоянием квантового регистра в квантовых алгоритмах является состояние, когда все кубиты инициализированы как $|0\rangle$.
3. Длительное время квантовой когерентности, чтобы иметь возможность за это время провести все необходимые операции.
4. Возможность реализации универсального набора вентилей, т.е. возможность перевести любое заданное начальное состояние кубитов в требуемое.
5. Возможность измерений индивидуальных кубитов, что позволяет получать результат вычислений.

Масштабируемость включает одновременное создание множества связанных кубит, имеющих свойства квантовых систем (суперпозиция, квантовая запутанность). При этом нужно отличать физические и логические кубиты.

Квантовая когерентность подразумевает сохранение информации в одном кубите квантового компьютера – носителе информации. При этом время когерентности должно быть значительно больше времени выполнения квантовой операции.

Квантовые логические элементы должны выполняться с помощью физических устройств и реализуют повороты квантового состояния кубита на сфере Блоха, где кубит описывается суперпозицией состояний $|0\rangle$, $|1\rangle$, а параметризация состояния кубита может задаваться углами поворота на сфере Блоха. При этом в момент измерения кубит приобретает значение либо 0, либо 1.

Для создания логических кубит, квантовые ошибки в которых устранены, используются дополнительные физические кубиты (иногда соотношение физических и логических кубитов достигает 1000^2)²

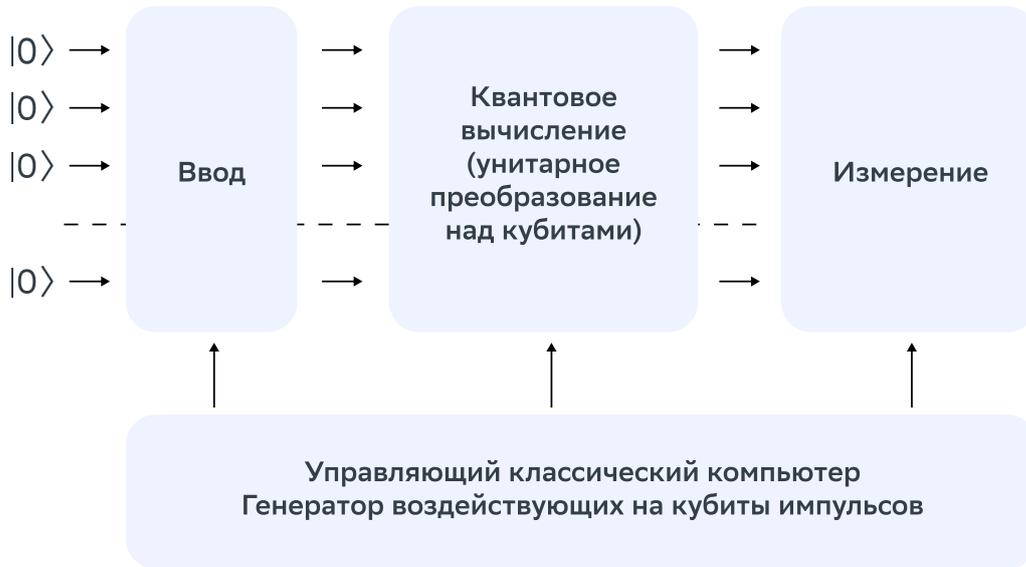


Сфера Блоха – способ представления состояний кубита в виде точек на сфере.

¹ DiVincenzo, David (16 December 1996). "TOPICS IN QUANTUM COMPUTERS". Mesoscopic Electron Transport. arXiv:cond-mat/9612126.

² Фаулер, Остин Г.; Мариантони, Маттео; Мартини, Джон М.; Клиланд, Эндрю Н. (2012). "Поверхностные коды: на пути к практическим крупномасштабным квантовым вычислениям". Физический обзор А. 86 (3): 032324. arXiv:1208.0928

Обобщенная схема квантового компьютера



Суть квантовых вычислений сводится к инициализации начального квантового состояния кубитов, преобразованиям для создания многокубитного запутанного состояния (набор операций задается квантовой цепочкой — последовательностью применений квантовых вентилей), измерений и дальнейшей интерпретации полученных результатов. При этом обычно реализуется множество запусков: тысячи и десятки тысяч запусков, из которой получается статистика распределения кубитов

по состояниям. Из постобработки статистики измерений получается результат работы того или иного алгоритма.

Для реализации этих основных функций должна проводиться работа на физическом уровне. Ниже показан процесс реализации квантовых вычислений на физическом уровне для ионного квантового компьютера ФИАН^{3,4}, разработанного в рамках «Дорожной карты».



³ Н. Колачевский, ФИАН <https://new.ras.ru/upload/iblock/5ee/jwc4n461ypz644bixc502kig7y585gl4.pdf>

⁴ Zalivako I. V. et al. Towards multiqubit quantum processor based on a $^{171}\text{Yb}^{\text{+}}$ ion string: Realizing basic quantum algorithms <https://arxiv.org/abs/2402.03121> – 2024.



Основные элементы архитектуры квантовых вычислений

Виды моделей квантовых вычислительных устройств

Цифровая (вентильная) модель — модель квантовых вычислений, в которых вычисление представляет собой последовательность инициализации кубитов, реализации логических операций (квантовых вентилях) и финальных измерений.

Квантовый отжиг — модель нахождения глобального минимума заданной целевой функции с использованием квантовых флуктуаций.

Фундаментальное различие между этими двумя подходами заключается в том, что квантовый компьютер с вентильной моделью является универсальным, тогда как устройства квантового отжига могут быть использованы только для решения определенного класса задач.

| | |
|----------------------------------|--|
| Кубиты | Фундаментальные единицы квантовой информации, способные представлять и обрабатывать множество состояний одновременно. |
| Квантовые гейты (вентили) | Операции, которые меняют состояния кубитов, аналогичны классическим логическим элементам, но обладают квантовыми свойствами, позволяющими выполнять сложные вычислительные процессы. |
| Квантовый регистр | Наборы кубитов, которые используются для выполнения вычислений. Они формируют основу для выполнения квантовых алгоритмов и хранения промежуточных результатов. |
| Квантовый алгоритм | Алгоритм для квантового процессора, который использует явления квантовой механики для представления информации и выполнения вычислений. |



Принципы квантовой механики в квантовых вычислениях

| | |
|-------------------------------|--|
| Суперпозиция | В отличие от классических битов, которые могут быть равны 0 или 1, квантовые биты или кубиты могут существовать в нескольких состояниях «одновременно», благодаря суперпозиции |
| Квантовый параллелизм | Способность квантовых систем существовать в нескольких состояниях одновременно позволяет одновременно производить большое количество вычислений с различными исходными данными |
| Квантовая запутанность | Позволяет соединять запутанные квантовые частицы таким образом, что состояние одной напрямую влияет на состояние другой |
| Квантовая декогеренция | Процесс изменения волновой функции при взаимодействии квантовой системы с окружением |

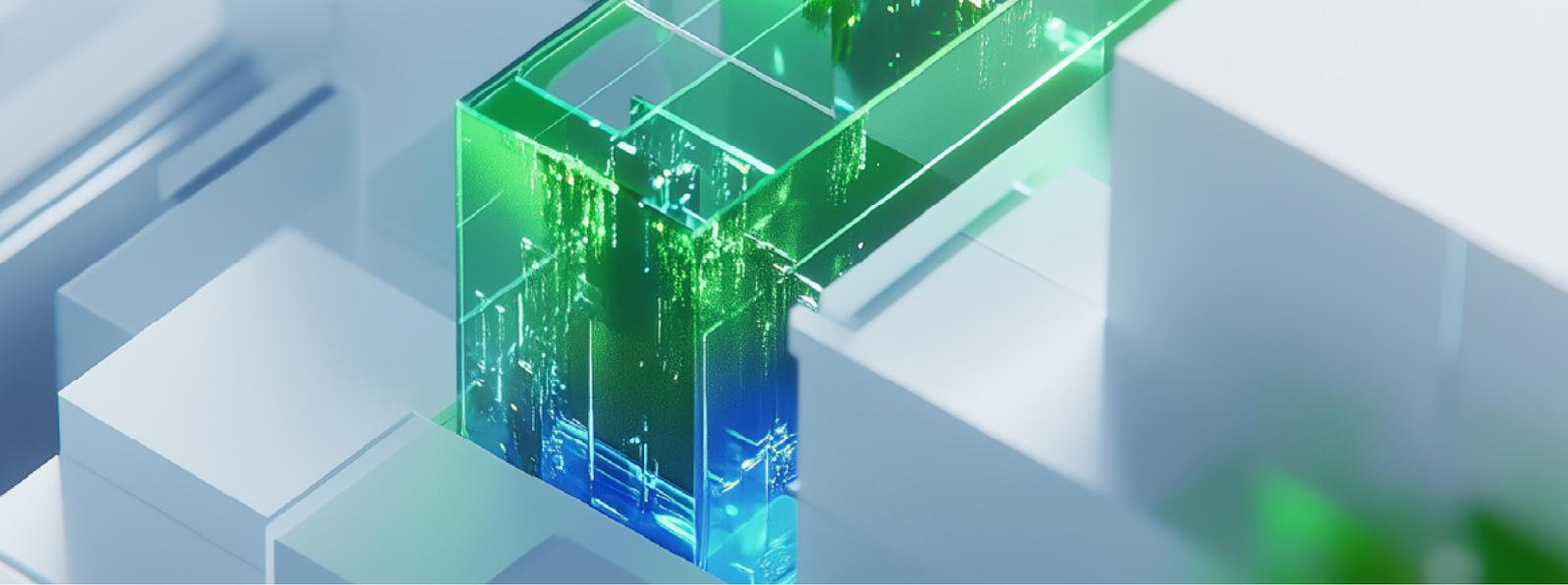
Использование квантовой суперпозиции и квантовой запутанности позволяет создавать на квантовом компьютере состояния, требующие экспоненциально больших классических ресурсов для их описания: состояния 50 кубитов запутанных определенным образом потребует до 2^{50} чисел для их описания. Тогда как одна операция на квантовом процессоре, соответствующая преобразованию этого состояния, будет требовать полного пересчета всех этих 2^{50} чисел. Использование такого сложного пространства состояний для решения практических задач составляет идею разработки квантовых алгоритмов: управление квантовым состоянием позволяет решать определенные вычислительные задачи многократно эффективнее классических вычислительных технологий.

Сложность создания квантового процессора с большим количеством кубитов и высокой точностью операций связана с тем фактом, что взаимодействие квантовой системы с окружением приводит к декогеренции, т.е. возникновению ошибок в ходе проведения вычислений. Для того, чтобы нивелировать эффект ошибок разрабатываются методы их коррекции и подавления. Последние экспериментальные результаты показали возможность реализации кодов коррекции ошибок в экспериментах с основными платформами для квантовых вычислений¹⁻³.

¹ "Quantum error correction below the surface code threshold" <https://www.nature.com/articles/s41586-024-08449-y>

² "Logical quantum processor based on reconfigurable atom arrays" <https://www.nature.com/articles/s41586-023-06927-3>

³ "Quantinuum's H1 quantum computer successfully executes a fully fault-tolerant algorithm with three logically-encoded qubits" <https://www.quantinuum.com/press-releases/quantinuum-h1-quantum-computer-successfully-executes-a-fully-fault-tolerant-algorithm-with-three-logically-encoded-qubits>



Типы квантовых компьютеров для реализации квантовых алгоритмов

Цифровые (вентильные) квантовые вычислительные устройства

Цифровые (вентильные) квантовые вычислительные устройства используют запутанные суперпозиционные состояния кубитов для реализации вычислений. В данный момент по этому принципу созданы устройства с сотнями кубитов.

Компания Atom Computing заявила о создании квантового компьютера на атомах с 1180 кубитами^{1,2}.

Адиабатические квантовые вычисления

Адиабатические квантовые вычисления работают с многокубитной системой в качестве носителя квантовой информации. Вместо того, чтобы реализовывать алгоритм в виде последовательности операций над отдельными кубитами или их парами, адиабатическая модель квантовых вычислений строится на управлении энергетической конфигурацией, в которой существует система (они описываются т.н. гамильтонианом системы). Вычисления стартуют с тривиального состояния системы³ – система находится в наиболее выгодном энергетическом состоянии для определенной тривиальной энергетической конфигурации. Далее происходит медленное (адиабатическое) изменение энергетической конфигурации. Адиабатическая теорема квантовой механики гарантирует, что если система изначально была в основном состоянии, то при адиабатической эволюции она останется в нем. Ответ вычислений – состояние системы в нетривиальной энергетической конфигурации. Адиабатическая модель квантовых вычислений полностью эквивалентна цифровой вентильной модели квантовых вычислений.

Важным преимуществом адиабатической модели является то, что она обладает внутренней устойчивостью к определенным типам квантовых ошибок. Универсальные адиабатические квантовые процессоры пока

не реализованы. Устройство квантового отжига компании D-Wave Systems можно рассматривать как первый шаг к адиабатическим квантовым вычислениям; однако такая система пока не способна на решение широкого класса задач и выполняет задачи только определенного класса. Кроме того, вопрос о том, может ли в таких условиях выполняться адиабатическая теорема является предметом исследования.

Программные эмуляторы квантовых компьютеров на CPU/GPU-архитектурах также могут быть эффективно использованы для построения промышленных приложений и предварительного тестирования квантовых алгоритмов.

В 2024 году компания D-Wave Systems решила задачу моделирования спинового стекла с использованием 5000-кубитного устройства квантового отжига.

¹ <https://www.forbes.com/sites/moorinsights/2023/10/24/atom-computing-announces-record-breaking-1225-qubit-quantum-computer/>

² <https://quantumzeitgeist.com/atom-computing-breaks-1000-qubit-threshold-pioneering-next-generation-quantum-computing/>

³ Fedorov, A. & Gisin, N. & Belousov, Serguei & Lvovsky, A.. (2022). Quantum computing at the quantum advantage threshold: a down-to-business review. <https://arxiv.org/abs/2203.17181>

Квантовые вычисления для материаловедения

Способность квантовых вычислений обрабатывать сложные квантовые взаимодействия делает их подходящими для материаловедения. Традиционные суперкомпьютеры сталкиваются с ограничениями при моделировании квантовых систем из-за экспоненциального роста вычислительных требований. Квантовые компьютеры, напротив, могут выполнять эти задачи более эффективно и смогут предложить точное моделирование и прогнозирование свойств материалов, имеют потенциал к ускорению вычислений. Эта возможность ускоряет открытие и разработку новых материалов с заданными свойствами для конкретных применений.

Эволюция квантовых вычислений

| | |
|---------|---|
| 1981 | Идея квантового компьютера как универсального симулятора для квантовых систем и популяризация концепции квантовых вычислений в лекциях (Р. Фейнман) |
| 1985 | Создание концепции универсального квантового компьютера (Д. Дойч) и изобретение машины Больцмана (Д. Хинтон и Т. Сейновски) |
| 1994 | Разработан квантовый алгоритм факторизации и дискретного логарифмирования с приложениями в области криптографии (П. Шор) |
| 1995 | Впервые реализована двухкубитная операция (К. Монро и Д. Вайнленд) |
| 1996 | Разработан квантовый алгоритм поиска в базах данных (Л. Гровер) |
| 1998 | Реализация квантового алгоритма на двухкубитном компьютере с ядерным магнитным резонансом (И. Чанг) |
| 1999 | Создание первого сверхпроводникового квантового компьютера (NEC) |
| 2011 | Создание первого коммерческого адиабатического квантового компьютера D-Wave One на 128 кубит (D-Wave) |
| 2016 | Доступ к квантовому компьютеру через облачную платформу (IBM) |
| 2017–18 | Разработка нескольких поколений сверхпроводниковых квантовых процессоров (IBM и Google) |
| 2019 | Квантовый компьютер на 53 кубита (Google) и первая демонстрация возможности квантового вычислительного преимущества |
| 2020 | Демонстрация квантового вычислительного преимущества с использованием фотонного процессора (Китай) |
| 2023 | Квантовое вычислительное устройство с 1121 кубитами на основе сверхпроводников (IBM) |
| 2023 | Демонстрация создания 48 логических кубитов (Qera) |
| 2023 | Эксперименты D-Wave с моделированием спинового стекла с использованием 5000-кубитного устройства квантового отжига |
| 2024 | Демонстрация 105-кубитного квантового процессора, возможности коррекции ошибок и квантового вычислительного преимущества (Google) |
| 2024 | Эксперименты Google и Quantinuum с коррекцией ошибок, показавшие снижение уровня ошибок при масштабировании кода |

Основные вызовы на пути создания мощных квантовых компьютеров

Масштабируемость: для решения сложных вычислительных задач квантовому вычислительному устройству требуется большой размер регистра (большое количество кубитов), т.е. система должна обладать определенным масштабом.

Когерентность: низкое время когерентности кубитов и декогеренция квантовых состояний приводит к ошибкам в ходе вычислений и, соответственно, малой производительности квантовых вычислительных устройств, что требует разработки методов подавления и коррекции ошибок.

В мире пока не выявлена единственная наиболее перспективная квантовая архитектура

Программные эмуляторы квантовых вычислений

Программные эмуляторы квантовых вычислений моделируют работу основных логических элементов квантового процессора на классических процессорах (CPU или GPU), при этом размер квантового процессора естественно ограничен ресурсами классического процессора. На практике эффективно может быть промоделировано около 30 кубитов.

В данный момент существует более 60 эмуляторов для моделирования работы алгоритмов на квантовых цепочках, 35 из которых являются открытыми библиотеками, в том числе Quirk, Yao.jl, Qulac¹.

Наиболее продвинутыми эмуляторами для квантового отжига являются *neal* (D-Wave) и решение корпорации Toshiba под названием «Simulated Bifurcation Machine», которое представляет собой комбинаторный оптимизатор, использующий алгоритм Simulated Bifurcation (алгоритм SB). В России эта сфера представлена квантово-вдохновленным алгоритмом SimCIM (разработан структурным подразделением «Куборд» Российского квантового центра).

Яркие компании глобального рынка, которые разрабатывают физические и программные архитектуры квантовых вычислений: **Google, IBM, Xanadu, Rigetti Computing, AWS, Microsoft, Qutech, QC Ware, D-Wave, AQT, Oxford Quantum Circuits, Alibaba Group, Quantinuum, IonQ.**

SDK

NVIDIA cuQuantum – это SDK для ускорения моделирования квантовых вычислений. Создан для ускорения работы всех платформ моделирования схем и интегрированный в Cirq, Qiskit, Penny lane и другие, cuQuantum позволяет исследователям моделировать квантовые вычисления с идеальными или шумными кубитами с высокой производительностью.

NVIDIA® CUDA-Q – первая платформа для гибридных квантово-классических компьютеров, предполагающая интеграцию и программирование на QPU, квантовую симуляцию, GPU и CPU в одной системе. CUDA-Q рассчитан на высокую производительность, имеет открытый исходный код и предоставляет язык высокого уровня для разработки и запуска гибридных квантово-классических приложений.

Аппаратно-ускоренные эмуляторы квантовых вычислений

NVIDIA CUDA-Q Academic – совместно с академическими институтами внедряет CUDA-Q в учебные аудитории колледжей с помощью самостоятельных онлайн-модулей, дополненных интерактивными упражнениями по программированию и видеороликами. Эти уроки с использованием CUDA-Q помогут студентам создавать и оптимизировать квантовые алгоритмы, используя как симуляторы, так и квантовое оборудование. Студенты получают навыки, необходимые для выполнения исследовательских проектов и разработки гибридных квантово-классических приложений.

Fujitsu's Digital Annealer – симулятор квантового отжига для решения крупномасштабных комбинаторных оптимизационных задач.

¹ <https://thequantuminsider.com/2022/06/14/top-63-quantum-computer-simulators-for-2022/>

Перечень языков и платформ программирования квантовых алгоритмов^{2,3}

| Язык программирования | Репозиторий |
|-----------------------|---|
| Qiskit (terra) | github.com/Qiskit/qiskit-terra |
| Qiskit (qiskit) | github.com/Qiskit/qiskit |
| QDK (Microsoft) | github.com/microsoft/Quantum |
| Q# | github.com/microsoft/qsharp-compiler |
| Cirq | github.com/quantumlib/cirq |
| PyQuil | github.com/rigetti/pyquil |
| Penny Lane | github.com/PennyLaneAI/pennylane |
| ProjectQ | github.com/ProjectQ-Framework/ProjectQ |
| OpenQASM | github.com/Qiskit/openqasm |
| Strawberry Fields | github.com/XanaduAI/strawberryfields |
| Yao | github.com/QuantumBFS/Yao.jl |
| Silq | github.com/eth-sri/silq |
| QASM | openqasm.com/intro.html |
| LIQ > | github.com/StationQ/Liquid |
| QMASM | github.com/lanl/qmasm |
| Paddle quantum | github.com/PaddlePaddle/Quantum |
| Quantum++ | github.com/vsoftco/qpp |
| Ocean | github.com/dwavesystems/dwave-ocean-sdk |
| QCL | github.com/aviggiano/qcl |
| Tequila | github.com/aspuru-guzik-group/tequila |
| pytket | github.com/CQCL/pytket |
| Scaffold | github.com/epiqc/ScaffCC |
| staq | github.com/softwareQinc/staq |
| Blackbird | github.com/XanaduAI/blackbird |
| cQASM | github.com/QE-Lab/libqasm |

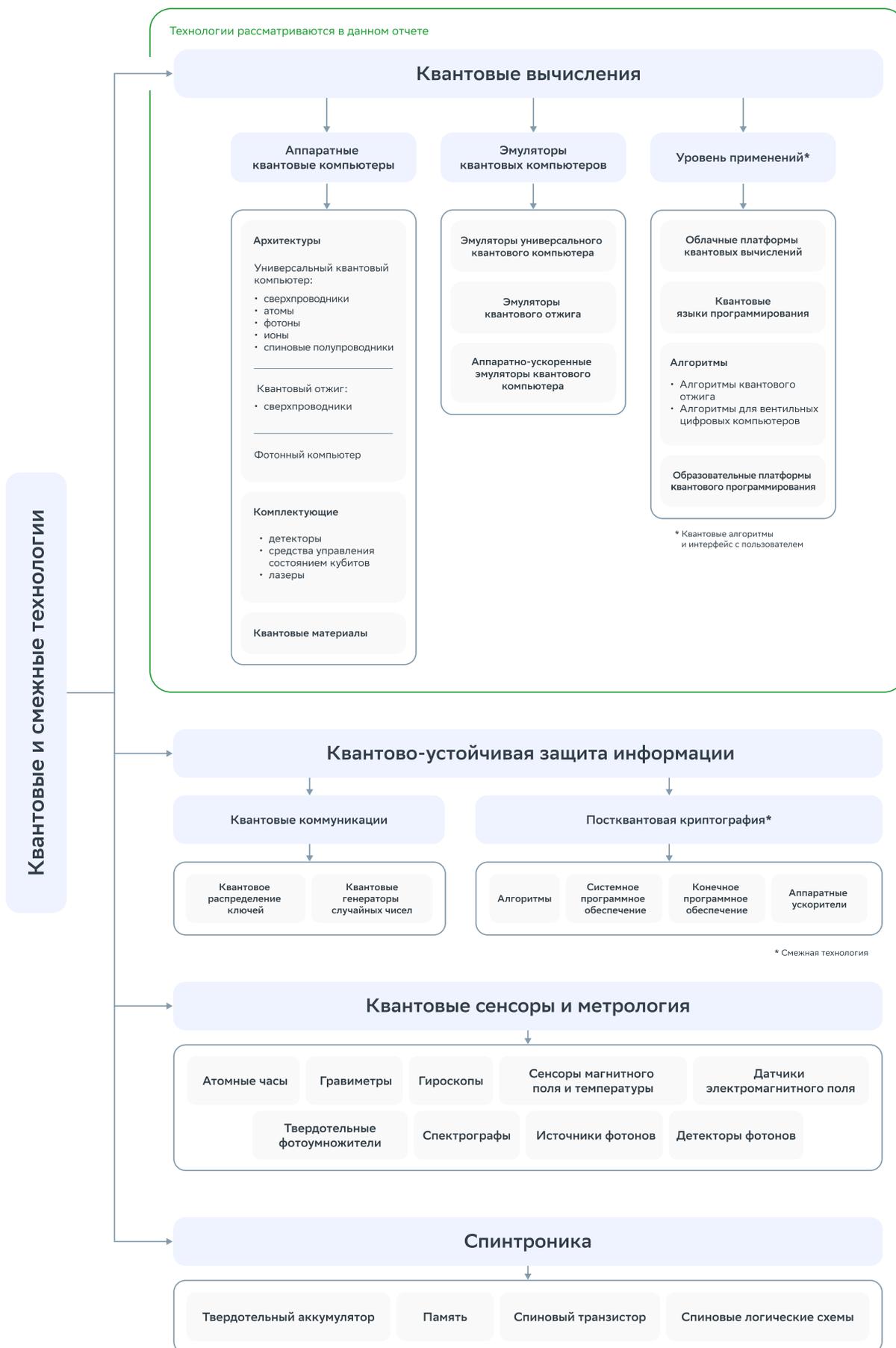
² <https://quantumzeitgeist.com/an-in-depth-look-at-the-popularity-of-quantum-computing-languages-and-frameworks/>

³ <https://thequantuminsider.com/2022/07/28/state-of-quantum-computing-programming-languages-in-2022/>

| Облачный сервис или маркетплейс | Компания | Сервис |
|---------------------------------|-----------|--|
| Amazon Braket | Toshiba | SQVM+ – квантово-вдохновленный алгоритм на основе эмулятора бифуркационной машины с 10 млн переменных. |
| Amazon Braket | D-Wave | <p>Leap Quantum Cloud Service – доступ к квантовому компьютерам D-Wave’s quantum computers и солверам для работы с 1 млн переменных и 1 млн ограничений.</p> <p>Quantum Proof of Concept – для помощи пользователям формулировать задачу, подбирать готовый прототип и тестировать на данных.</p> <p>Quantum Feature Selection for Machine Learning, который использует квантово-гибридные подходы к оптимизации выбора признаков, обучения и прогноза.</p> <p>Quantum Consulting Services – консалтинговые услуги.</p> |
| IBM Quantum Cloud | IBM | Платформа квантовых вычислений, позволяет пользователям запускать квантовые алгоритмы как на симуляторе, так и на реальном компьютере. Можно изучать учебные пособия и модели, позволяющие понять, что возможно с помощью квантовых вычислений. Разработка квантовых алгоритмов поддерживается с помощью Qiskit. |
| Quantum AI | Google | Платформа для комбинированного использования квантовых вычислений и искусственного интеллекта. |
| Azure Quantum Elements | Microsoft | Azure Quantum Elements специально создан для ускорения научных открытий. Использует оптимизированные для масштабирования высокопроизводительные вычислительные кластеры Azure (HPC), ускоряемые искусственным интеллектом. |
| Intel Quantum Simulator | Intel | Облачный высокопроизводительный симулятор квантовых вентилей – испытательный стенд для изучения квантовых вычислений с помощью классического моделирования. IQS моделирует квантовые схемы, оптимизированные для использования преимуществ многоядерных и многоузловых архитектур. Состояние кубита представлено полностью, но при этом отсутствуют элементы управления и другие квантовые операции. IQS использует протоколы интерфейса передачи сообщений MPI для управления связью между распределенными ресурсами, которые используются для хранения квантового состояния и управления им. |

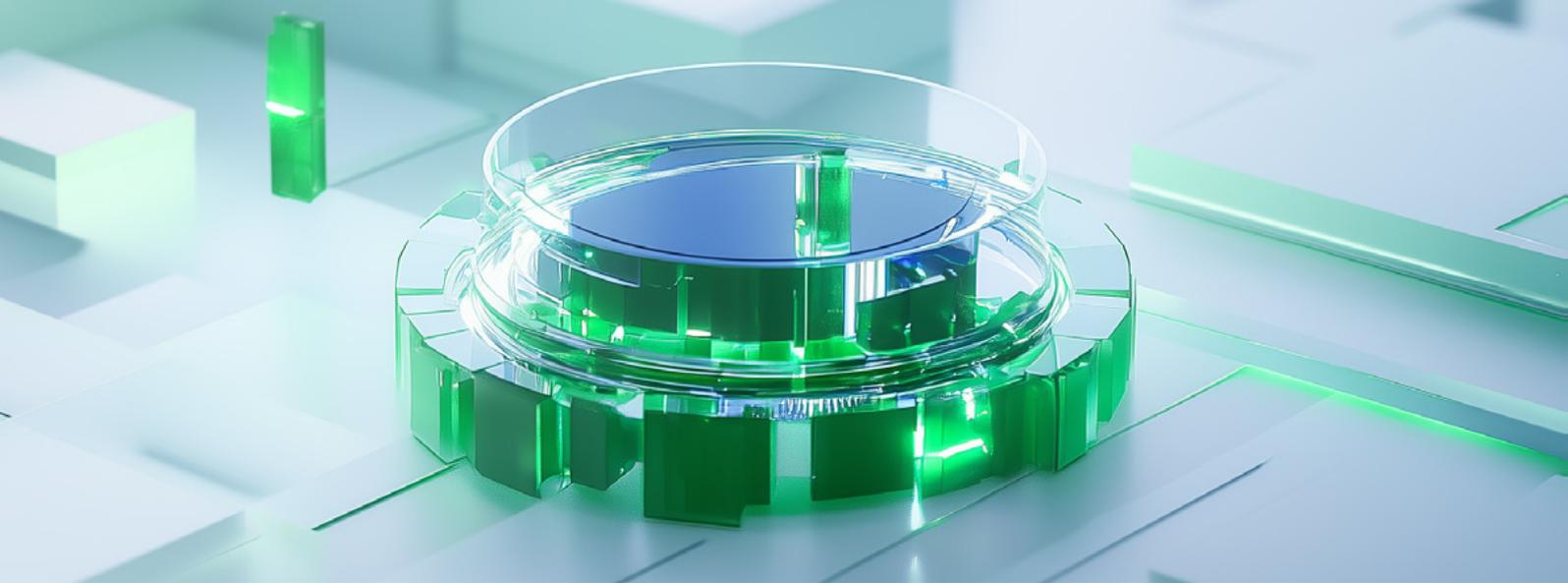
| Облачный сервис или маркетплейс | Компания | Сервис |
|---|-------------------------------------|--|
| Alibaba Cloud Quantum Development Platform | Alibaba | <p>Платформа для разработки алгоритмов квантовых вычислений и квантовых процессоров.</p> <p>Использует большие классические вычислительные ресурсы Alibaba для помощи в разработке таких приложений и квантовых компьютеров.</p> <p>В основе AC-QDP лежит большой классический симулятор, размещенный на Alibaba Cloud и доступ к квантовому компьютеру 11 кубит.</p> |
| IonQ Quantum Cloud | IonQ | Платформа доступа к IonQ QPU, шумным и идеальным симуляторам. |
| Photonics Quantum Cloud Platform | Xanadu | Платформа доступа к симуляторам и квантовому компьютеру на фотонах. |
| Rigetti Quantum Cloud Services | Rigetti Computing | <p>Облачный сервис, основанный на квантовых вычислениях.</p> <p>Он предоставляет пользователям доступ к гибридным вычислительным системам: как к собственным процессорам, так и к традиционным серверам.</p> <p>Пользователи получают доступ к виртуальному образу гибридного компьютера, имеющему свойства классического и квантового.</p> |
| Forge | QC Ware | Квантовая программная платформа, разработанная для того, чтобы дать предприятиям возможность изучать квантовые вычисления и извлекать из них ощутимую выгоду. Forge позволяет исследователям и разработчикам экспериментировать с квантовыми алгоритмами, моделировать квантовые схемы и тестировать их производительность на квантовом оборудовании ведущих поставщиков, таких как IBM, Rigetti и D-Wave. |
| Quantum Computing as-a-Service (QCaaS) platform | Oxford Quantum Circuits | Платформа предоставляет квантовые вычисления как услугу (CaaS). Основная технология OQC, Coaxmon, обеспечивает масштабируемость и высокую точность работы их сверхпроводящих квантовых процессоров. |
| Quantinuum AI platform | Quantinuum | Платформа включает обработку естественного языка, квантовое машинное обучение и квантовое глубокое обучение. |
| QBoard | ООО «Облачные квантовые технологии» | Унифицированный интерфейс для квантовых компьютеров и эмуляторов отечественной разработки. Платформа QBoard позволяет ускорить решение задач оптимизации, обработки больших данных и проведения сравнительных тестов перспективных вычислительных архитектур. |

Квантовые и смежные технологии





Квантовые вычисления в материаловедении



Основные методы моделирования квантовой химии

Метод связанных кластеров

Метод связанных кластеров является «золотым стандартом» квантово-химических расчётов. В этом методе в структуру волновой функции включаются специфические «кластерные» операторы, которые позволяют корректно описать возбуждения различных порядков. Этот метод позволяет получить наиболее близкое к точному решению уравнения Шрёдингера и хорошо описывает электронную корреляцию.

Метод теории функционала плотности

Приближённый метод решения уравнения Шрёдингера путём использования понятия электронной плотности в основном состоянии, её распределение описывается одночастичным уравнением Шрёдингера.

Метод молекулярной динамики

Для таких задач, как определение коэффициентов диффузии, оценка условий и энергий фазовых переходов или определение структурных особенностей поведения больших ансамблей частиц, не всегда важно учитывать изменения точного распределения электронной плотности или специфические квантовые эффекты. В таких ситуациях достаточно использовать модели классических физических теорий, таких как классическая молекулярная динамика.

Метод USPEX

Метод компьютерного предсказания кристаллических структур USPEX был разработан А. Огановым, а также его коллегами А. Ляховым, К. Гласом, Ц. Чжу и др.^{1,2}. USPEX позволяет предсказывать кристаллическую структуру при произвольных условиях (давлении и температуре), исходя из знания только химического состава материала. Помимо предсказания структур кристаллов, USPEX способен предсказывать структуры низкоразмерных материалов: наночастиц, полимеров, поверхностей и 2D-кристаллов. Также метод может предсказывать химические составы веществ. Работы группы Оганова посвящены изучению структуры различных материалов, в том числе поиску сверхпроводниковых материалов при нормальных условиях.

В своей основе метод использует вычислительные подходы квантовой химии и опирается на эволюционные алгоритмы, машинное обучение и молекулярное моделирование. Квантовые вычисления могут быть полезны для развития метода USPEX в части применения методов квантовой химии с использованием квантовых компьютеров, а также в части интеграции с алгоритмами вантового отжига для решения оптимизационных задач.

¹ Troyan I.A., Semenov D.V., Ivanova A.G., Kvashnin A.G., Zhou D., Sadakov A.V., Sobolevsky O.A., Pudalov V.M., Lyubutin I.S., Oganov A.R. High-temperature superconductivity in hydrides. *Physics-Uspekhi*, 192, 799–813. (pdf-file). (2022).

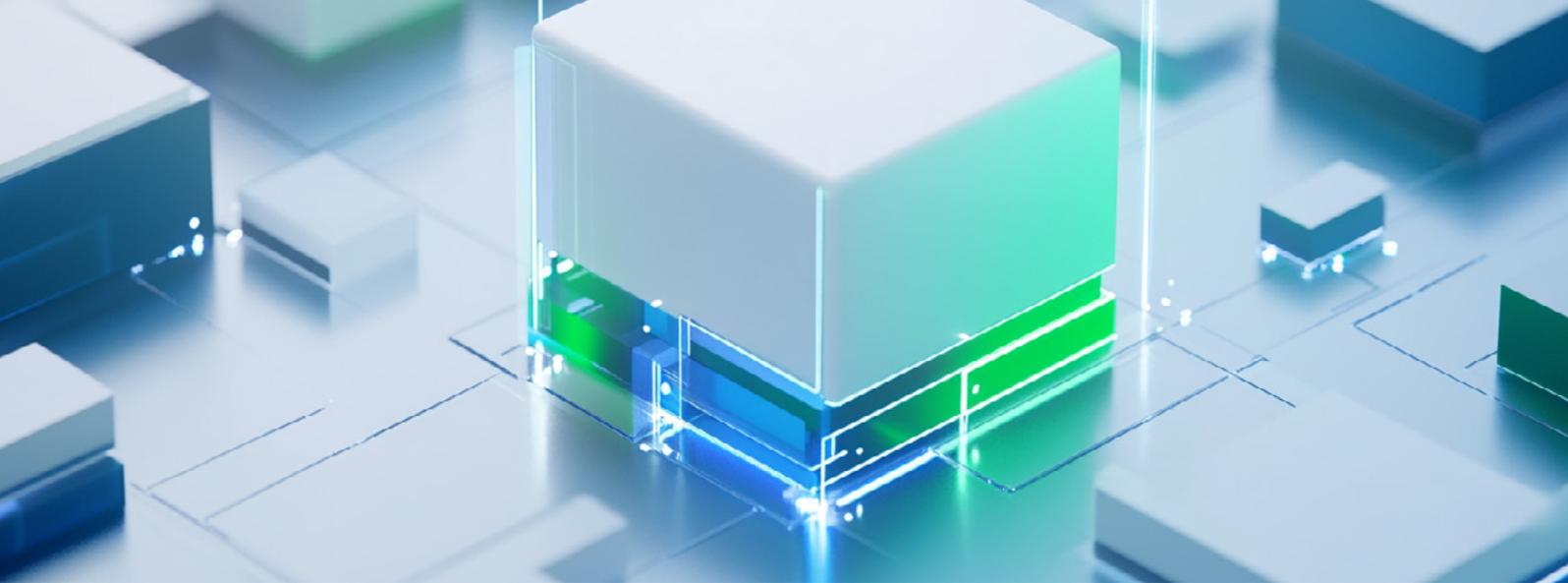
² Computational prediction of new magnetic materials. *J. Chem. Phys.*, 157, 124704. (pdf-file) Rahmanian Koshkaki S., Allahyari Z., Oganov A.R., Solozhenko V.L., Polovov I., Belozherov A., Katanin A., Anisimov V.I., Tikhonov E., Qian G.R., Maksimov K., Mukhamadeev A., Chukin A., Korolev A., Mushnikov N., Li H. (2022).

Примеры компаний, применяющих квантовые вычисления для разработки новых материалов

| Компания | Направление применения квантовых вычислений |
|-----------------------------|---|
| BASF | Прогнозирование химической реактивности веществ в химической промышленности |
| VW, Nissan | Оптимизация аккумуляторов |
| Airbus | Катализаторы топливных элементов, антикоррозионные покрытия |
| BMW Group | Катализаторы топливных элементов |
| IARPA | Моделирование квантовых магнитов |
| OTI Lumionics | Дисплеи |
| Boeing | Моделирование процессов коррозии для улучшения композитов |
| JSR Corporation, Mitsubishi | OLED источники света, разработка аккумуляторов |
| Daimler-Benz | Разработка аккумуляторов |

Таким образом, квантовая механика, описывающая поведение частиц на атомном и субатомном уровнях, дает необходимое для материаловедения базисное описание материала, используемое для изучения его свойств. Традиционные вычислительные методы квантовой химии в большинстве случаев сталкиваются со сложностью моделирования квантовых взаимодействий в материалах: необходимые ресурсы для точного моделирования взаимодействующей квантовой системы экспоненциально растут в зависимости от размера системы. Квантовые вычисления позволяют решать эту задачу значительно более эффективно – с полиномиальными ресурсами, что открывает путь к более точному моделированию больших квантовых систем, которые лежат в физической основе того или иного материала, обеспечивая более глубокое понимание поведения и свойств.

Применение квантовых вычислений для материаловедения является значительным скачком вперед в разработке и синтезе новых материалов. Уникальные возможности квантовых вычислений позволяют по-новому понимать свойства материалов и, таким образом, трансформируют материаловедение.



Перспективные направления развития квантовых технологий и новых материалов

Новые материалы — это материалы, которые разрабатываются и создаются с использованием инновационных технологий и подходов. Они отличаются от традиционных материалов своими уникальными свойствами.

Например, углеродное волокно — наноматериал, состоящий из тонких нитей диаметром от 5 до 15 мкм, образованных преимущественно атомами углерода. Атомы углерода объединены в микроскопические кристаллы, выровненные параллельно друг другу.

Углеродные волокна активно используются как основа новых материалов и характеризуются высокой прочностью (несколько тысяч МПа), высокими значениями модуля упругости (несколько сотен ГПа), стойкостью к атмосферным воздействиям, агрессивным средам и термостойкостью, удельной плотностью 1,8 г/см³ и могут применяться для строительства мостов^{1,2}.

Конструкционные и композиционные материалы с улучшенными эксплуатационными свойствами



«Самозалечивающиеся» материалы



Биоразлагаемые полимеры



Полимеры с эффектом «памяти формы»

Новые технологии для агропрома и пищевой промышленности



Биопрепараты для защиты и повышения урожайности агрокультуры



Наномембраны для очистки воды



Проточные цитометры для контроля качества ферментируемых продуктов

Углеродные наноматериалы



Графеновые нанопластины



Углеродные нанотрубки



Фуллерены



Наноалмазы

Новые материалы и нанотехнологии для энергетики



Квантовые точки (полупроводниковые нанокристаллы)



Топливные элементы



Микро-комбинированные теплоэнергетические устройства



Мембранные установки



Солнечные батареи нового поколения

¹ Xu, Y., Liu, Y., Chen, S., and Ni, Y. (2020). "Current overview of carbon fiber: Toward green sustainable raw materials," *BioRes.* 15(3), 7234-7259. <https://bioresources.cnr.ncsu.edu/resources/current-overview-of-carbon-fiber-toward-green-sustainable-raw-materials/><https://www.prnewswire.com/news-releases/inflexion-accelerates-commercialization-of-quantum-products-at-scale-with-silicon-photonics-acquisitions-302046294.html>

² Sharma, Piyush. (2013). Carbon Fiber as a Recent Material Used in Construction. (National Conference). 10.13140/RG.2.1.3079.2727. https://www.researchgate.net/publication/278023756_Carbon_Fiber_as_a_Recent_Material_Used_in_Construction_National_Conference

Материалы для аддитивного производства



Фотополимеры



Термопласты



Металлические порошки

Биомиметические материалы и материалы медицинского назначения



3D-печать медицинских изделий (биосенсоров, протезов, имплантов и т. д.)



Носимые медицинские устройства



Эпигенетические биомаркеры

Новые материалы для электроники



Наносенсоры



Мемристоры



Печатная электроника



Гибкая электроника



Молекулярная электроника и биоэлектроника

Новые материалы

Потенциально вытесняемые традиционные материалы

Аэрогель

Традиционная изоляция, стекло

Аморфный металл

Кевлар

Проводящие полимеры

Проводники

Фуллерен

Синтетический алмаз

Графен

Интегральная схема на основе кремния

Сверхпроводники

Медный провод, полупроводниковые интегральные схемы

Светопроницающий бетон

Стекло

Метаматериалы

Оптическое стекло

Металлическая пена

Сталь

Многофункциональные конструкции

Композиционные материалы

Углеродные нанотрубки

Конструкционная сталь и алюминий

Программируемая материя

Покрытия

Квантовые точки

Материалы светодиодов

Силицен

Кремний для полевых транзисторов

Квантовая химия и квантовая механика как основа квантовой химии

Анализ свойств материалов, а также изменение этих свойств в зависимости от различных факторов является предметом материаловедения. К изучаемым свойствам материалов относятся: структура, электронные, термические, химические, магнитные, оптические свойства этих веществ. Создание материала с желаемыми свойствами подразумевает обработку и интерпретацию параметров материала, получаемых как экспериментальным, так и теоретическим путем.

Наноматериалы, как один из видов новых материалов, имеющих нелинейные или даже квантовые свойства, имеет размер в одной из плоскостей от 1 нм до 100 нм, требует особых методов их исследования, в том числе моделирования¹.

Моделирование и прогнозирование поведения сложных квантово-механических систем имеет решающее значение для разработки продуктов на основе новых материалов – эти задачи являются частью квантовой химии.

Квантовая химия – направление теоретической химии, рассматривающее строение и свойства химических соединений, реакционную способность, кинетику и механизм химических реакций с использованием квантовой механики.

Квантовая механика – физическая теория, которая описывает природу в масштабе атомов и субатомных частиц. Квантовая химия базируется на квантовой механике. Энергетические уровни атомов и молекул описываются в парадигме квантовой механики, что служит основой для квантовой химии.

Отличия квантовой механики от классической физики

- Энергия, импульс, угловой момент и другие величины связанного состояния системы ограничены дискретными значениями (**квантование**).
- Объекты обладают характеристиками как частиц, так и волн (**корпускулярно-волновой дуализм**).
- Существуют пределы точности предсказаний значений физической величины до её измерения при заданном полном наборе начальных условий (**принцип неопределённости**).

Квантовая химия широко использует экспериментально установленные закономерности в свойствах и поведении химических соединений, включая в том числе закономерности классической теории химического строения.

Моделирование молекул полимеров, твердых тел, с высокой точностью и без экспериментального синтеза материалов в лаборатории позволяет идентифицировать эффективные молекулярные структуры, которые удовлетворяют желаемым свойствам, например таким, как высокая плотность энергии.

Квантовая химия позволяет установить:

- электронную структуру молекулярных систем (прежде всего, распределение электронной плотности и ее изменение во времени);
- равновесные свойства, такие как геометрическое строение, энергия диссоциации, потенциалы ионизации и энергия сродства к электрону;
- молекулярные свойства веществ, амплитуды вероятности нахождения электронов в определенных состояниях, симуляции взаимодействия молекул.

¹ Baig, Nadeem & Kammakam, Irshad & Falath, Wail. (2021). Nanomaterials: A review of synthesis, properties, recent progress, and challenges. *Materials Advances*. 2. 10.1039/D0MA00807A. <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2021/ma/d0ma00807a>

Классическим примером применения квантовой химии является процесс Габера-Боша

Промышленное производство химических веществ, такое как каталитическая азотфиксация аммиака в процессе Габера-Боша, потребляет **1-3% мирового производства энергии** и приводит к **1,4% выбросов углекислого газа**. В крупных масштабах даже относительно небольшие улучшения могут привести к значительному экологическому эффекту². Квантовые вычисления имеют потенциал решить данную задачу более оптимальным способом: по текущим оценкам для решения потребуется около 4 млн физических кубитов и 4 дня вычислений³.

Основной задачей квантовой химии является решение уравнения Шрёдингера и его релятивистского варианта (уравнение Дирака) для атомов и молекул. Уравнения Шредингера и Дирака позволяют определить вероятностное распределение характеристик квантовых систем. Уравнение Шредингера — линейное дифференциальное уравнение в частных производных, описывающее изменение в пространстве квантового состояния, задаваемого волновой функцией. Сформулировано Э. Шрёдингером в 1925 году методом аналогии с классической оптикой, на основе обобщения экспериментальных данных и идеи представления частицы в виде волны Де-Бройля, опубликовано в 1926 году⁴. В 1932 году Э. Шредингеру была присуждена Нобелевская премия.

Для большого количество атомов и молекул уравнение Шредингера является квантовой задачей многих тел. Оно решено в общем виде аналитически для задачи двух тел, например, атома водорода как взаимодействующего протона и электрона. Задача двух и более тел уже является

экспоненциально сложной — это связано с тем, что потенциальная энергия кулоновского взаимодействия в уравнении зависит от пространственного расположения частиц, а движение любой одной частицы зависит от движения всех других частиц в системе. Например, задача об атоме гелия, состоящем из протона и двух электронов, не решена аналитически, однако её численное решение известно с высокой степенью точности и подтверждается экспериментами. При этом точное решение обладает экспоненциальной сложностью.

Существуют приближенные и численные методы решения. Например, при использовании одноэлектронного приближения, когда волновая функция многоэлектронной системы представляется в виде произведения волновых функций отдельных электронов, уравнение Шредингера решается отдельно для каждого электрона. Однако такие методы ограничены в точности и не могут быть использованы для определенных задач.

Примеры квантовых систем:

- Электрон
- Фотон
- Ядро атома
- Атом
- Молекула
- Молекулярная система

Примеры характеристик квантовой системы:

- Энергия
- Координата
- Спин (собственный момент импульса)

² Kozuch, S., & Shaik, S. (2008). Kinetic-quantum chemical model for catalytic cycles: the Haber-Bosch process and the effect of reagent concentration. *The journal of physical chemistry. A*, 112(26), 6032–6041. <https://doi.org/10.1021/jp8004772> <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/18537227/>

³ “Even more efficient quantum computations of chemistry through tensor hypercontraction” <https://arxiv.org/abs/2011.03494>

⁴ Schrödinger, E. (1926). “An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules” (PDF). *Physical Review*. 28 (6): 1049–70 https://virgilio.mib.infn.it/~oleari/public/MQ/Schroedinger_2nd_paper.pdf

Интервью Луиса Давидовича

Комментарии экспертов



Луис Давидович

Профессор физики в Федеральном университете Рио-де-Жанейро

Работы Луиса Давидовича посвящены квантовой оптике и квантовой теории информации. Его основные труды относятся к изучению декогеренции, запутанности, теории лазеров и квантовой метрологии. Он подробно проанализировал динамику квантовых систем и явление квантовой запутанности в условиях взаимодействия с окружением, а также внес свой вклад в теоретические разработки и предложения по проведению экспериментов в квантовой метрологии.

Каковы основные области применения квантовых вычислений?

Существует множество потенциальных применений квантовых вычислений, таких как разработка лекарств, новых материалов, финансовое моделирование и моделирование климата. Возможность применения квантовых вычислений, однако, от возможности в ближайшее время решать сложные задачи, связанные со снижением влияния уровня шумов на процессы квантовых вычислений. Еще одним важным аспектом является тот факт, что универсальным квантовым вычислениям предстоит пройти долгий путь к практическим применениям, тогда как специализированные квантовые вычислительные устройства уже сейчас тестируются в задачах разработки лекарств и исследований новых материалов. Также устройства квантового отжига компании D-Wave уже используются для решения задач фундаментальной физики, логистики и финансов.

Как вы оцениваете прогресс в области квантовых вычислений за последние 3 года?

Многие компании и исследовательские институты добились прогресса в разработке как аппаратного, так и программного обеспечения. Это позволило увеличить количество кубитов в квантовых компьютерах. Две компании, Atom Computing и IBM, создали квантовые компьютеры, количество кубит в которых превысило 1000. Кубиты используются для вычислений и исправления ошибок. Появилось много новых компаний, таких как Alphabet, Quantinuum, D-Wave и IonQ с различными новыми идеями по развитию квантового аппаратного обеспечения. Были достигнуты заметные улучшения в методах квантовой коррекции ошибок, которые необходимы для раскрытия потенциала квантовых вычислений. Следует отметить, что квантовые компьютеры являются частью более общей системы квантовых технологий, которая включает в себя, помимо квантовых вычислений, также квантовые сенсоры и квантовые коммуникации.

Мои собственные исследования были посвящены квантовым системам, взаимодействующим с окружающей средой, и привели к результатам, касающимся устойчивости запутанности, которые важны для квантовых вычислений.

В последнее время я занимаюсь исследованиями в области квантовой метрологии и квантовых датчиков, в ходе которых я и мои коллеги показали, что использование запутанных состояний может значительно повысить точность оценки физических параметров, особенно тех, которые связаны с взаимодействием системы с окружающей средой, таких как поглощение или деполяризация света.

Развитие квантовой метрологии — очень многообещающий компонент квантовых технологий, приводит к важным технологическим инновациям, таким как создание новых гравиметров, которые могут быть использованы для обнаружения подземных вод и нефти, и чрезвычайно точные атомные часы для чувствительной GPS и космической навигации. Квантовая метрология также позволит обнаруживать гравитационные волны с помощью чувствительных оптических интерферометров, тем самым расширив диапазон наблюдений за Вселенной.

Каковы основные достижения в области квантовых вычислений за последние 3 года?

5 июня 2024 года компания Quantinuum представила квантовый процессор с 56 кубитами из захваченных ионов в ловушке с высочайшей на данный точностью выполнения операций, необходимой для вычислений. Ионы, которые играют роль кубитов, улавливаются электромагнитными полями и ими можно манипулировать с помощью лазеров.

Также совершенствуются методы исправления ошибок. В феврале 2023 года Google усовершенствовала систему квантовой коррекции ошибок, используя специальное расположение кубитов. В марте 2024 года IBM сообщила о новой схеме исправления ошибок, которая примерно в 10 раз эффективнее предыдущих методов.

Улучшение методов управления отдельными атомами в электромагнитных полостях и отдельными ионами в электромагнитных полях было отмечено Нобелевской премией по физике 2012 года, присужденной совместно Дэвиду Уайнленду и Сержу Аарошу «за новаторские экспериментальные методы, позволяющие измерять отдельные квантовые системы и манипулировать ими». Эти эксперименты в области фундаментальной науки проложили путь к применению в квантовых технологиях, требующих точного контроля операций с отдельными атомами, ионами и фотонами.

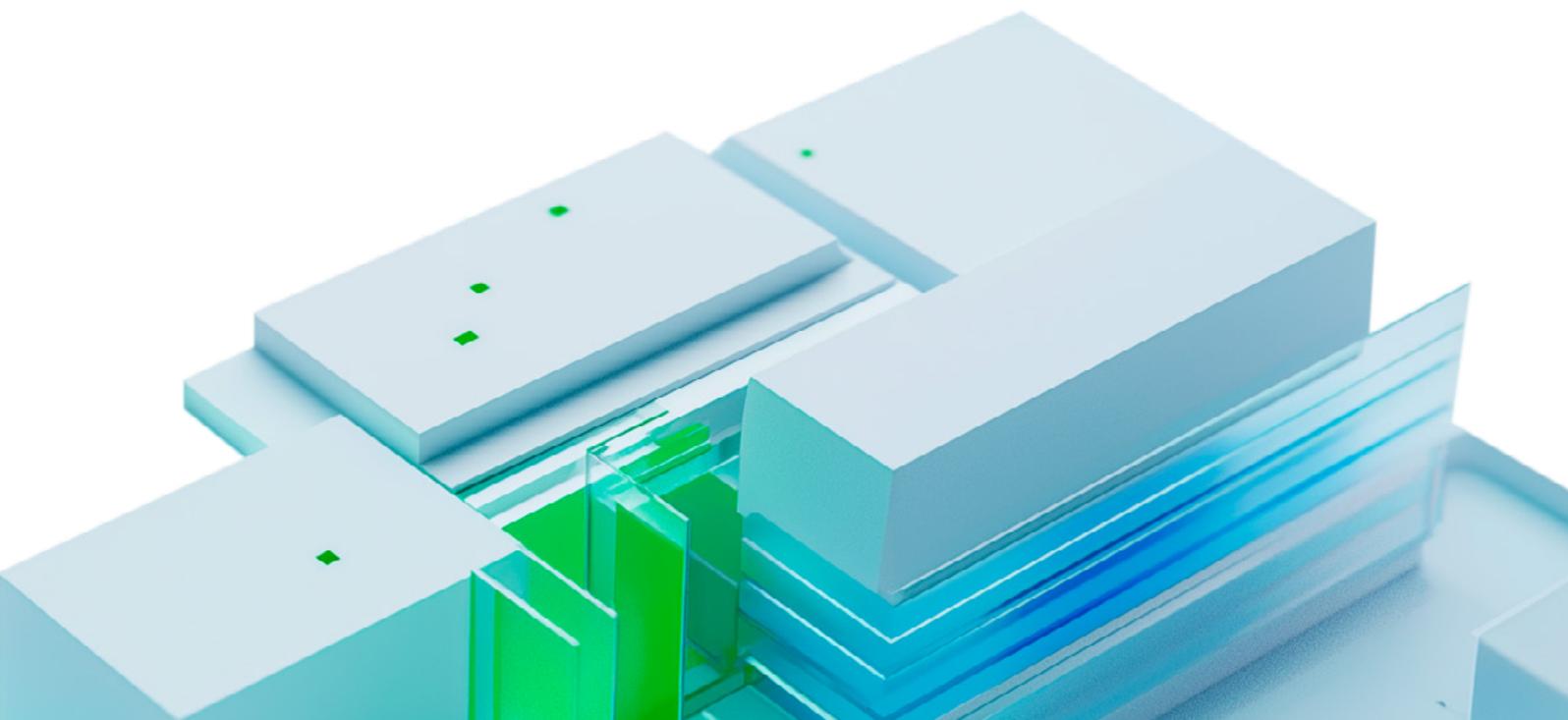
Нобелевская премия по физике 2022 года была присуждена совместно Алену Аспе, Джону Ф. Клаузеру и Антону Цайлингеру «за эксперименты с запутанными фотонами, установление нарушения неравенств Белла и новаторство в квантовой информатике». Неравенства Белла имеют дело с запутанностью, существенным свойством квантовой физики, которое играет важную роль в новых квантовых технологиях. Состояния Белла — это особые запутанные состояния двух частиц.

Одна из наших недавних разработок в Федеральном университете Рио-де-Жанейро касается роли состояний Белла в квантовой метрологии.

Каковы ключевые проблемы в области передовых материалов, которые мы можем решить с помощью квантовых компьютеров?

Моделирование с помощью квантовых алгоритмов может дать представление об электронных свойствах материалов, которые трудно рассчитать классическими методами из-за их сложности. Оно может ускорить открытие новых материалов с требуемыми свойствами для электроники, сверхпроводников и катализаторов, моделируя взаимодействия на квантовом уровне. Такое моделирование может помочь симулировать и понять фазовые переходы в материалах и полезно для проектирования материалов с особым поведением в изменяющихся условиях.

В целом несмотря на то, что предстоит преодолеть еще много вызовов, развитие квантовых технологий, таких как квантовые вычисления и, в частности, квантовое моделирование, квантовые коммуникации и квантовая метрология, прокладывает путь к прорывам в различных областях промышленности.





Применение квантовых вычислений в материаловедении

Расширенные возможности моделирования

Квантовые компьютеры могут моделировать квантовые системы с беспрецедентным масштабом и точностью. Эта возможность имеет решающее значение для понимания свойств материалов на атомарном уровне, прогнозирования поведения и проектирования материалов с желаемыми характеристиками. Например, становится возможным моделирование электронной структуры сложных молекул, что позволяет создавать новые материалы для различных применений. Одна из причин, по которой разработка материалов занимает длительное время, заключается в том, что классические компьютеры испытывают трудности при решении задач точного моделирования материалов.

Нанотехнологии и электроника

Квантовые вычисления поддерживают разработку наноматериалов и электронных устройств с улучшенными свойствами и способствуют проведению исследований наноматериалов на атомарном уровне, что приводит к инновациям по созданию более компактных, быстрых и эффективных электронных компонентов.

Экономичность

Эффективность квантовых вычислений снижает затраты и время, связанные с открытием и тестированием материалов. Обеспечивая более точное моделирование, квантовые компьютеры сводят к минимуму необходимость в масштабных физических экспериментах, экономя ресурсы и ускоряя цикл инноваций. Кроме того, использование квантовых вычислений является более энергоэффективным по сравнению с классическими подходами.

Наука об окружающей среде и устойчивом развитии

Квантовые вычисления позволяют рассчитывать химические реакции для более эффективного получения востребованных химических соединений (что может экономить значительную энергию и быть более экологичным), а также синтезировать новые материалы для улавливания углерода, рационального использования ресурсов, а также для зеленой энергетики.

Хранение и преобразование энергии

Квантовые вычисления способствуют разработке экологически чистых материалов для строительства, упаковки, позволяют моделировать материалы для борьбы с загрязнениями, разработки технологий улавливания углерода и рационального использования ресурсов для снижения воздействия на окружающую среду.

Ускорение открытий и инноваций

Традиционные процессы поиска материалов требуют много времени и ресурсов. Квантовые вычисления смогут ускорить эти процессы, обеспечивая быстрое моделирование и прогнозы. Исследователи могут более эффективно исследовать обширную область проектирования, выявляя перспективные материалы и оптимизируя их свойства без длительных проб и ошибок.

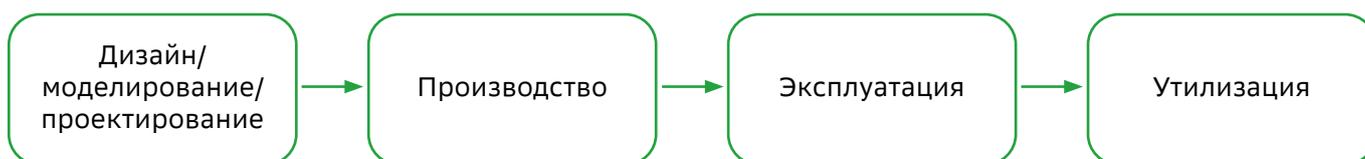
Усовершенствованный дизайн материалов

Квантовые вычисления могут улучшать дизайн материалов, позволяя просчитывать различные конфигурации и выявляя более эффективные. Исследователи могут создавать материалы с необычными свойствами, такими как повышенная прочность, сверхпроводимость или долговечность.

Для моделирования структуры молекулы обычного лекарственного средства, такого как пенициллин, которая в основном состоит из 41 атома, требуется классический компьютер с примерно 10^{86} битами¹ – для чего понадобится больше транзисторов, чем атомов в обозримой Вселенной. Такая машина физически невозможна.

Но для высокопроизводительного квантового компьютера этот тип моделирования вполне возможен.

Цикл создания новых материалов

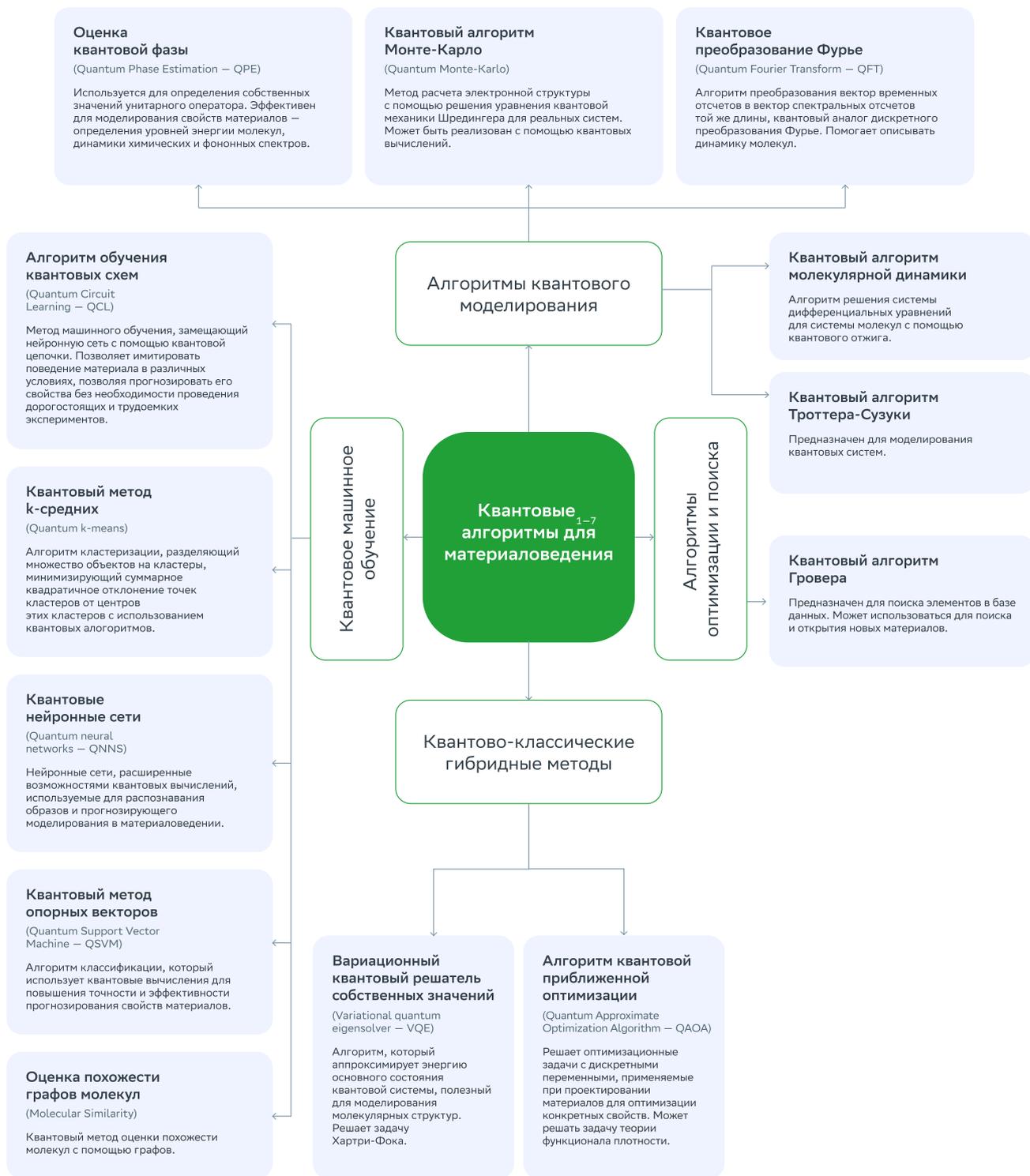


Становится возможным:

1. Моделирование материалов на атомарном (субатомном) уровне с высокой точностью.
2. Моделирование поведения материалов и анализ данных в реальных условиях эксплуатации, например, при различных типах напряжений, включая растягивающие, сжимающие и сдвигающие.
3. Имитирование поведения материала в различных условиях, без необходимости проведения дорогостоящих и трудоемких экспериментов.
4. Оптимизация плана эксперимента и сокращения количества необходимых экспериментов.
5. Классификации и кластеризации веществ в материале.
6. Моделирование дефектов и беспорядка в материалах.
7. Ускорение расчета электронной структуры твердого тела.
8. Комбинаторная химия для разработки новых катализаторов.
9. Моделирование поведения электронов в кристаллической решетке материала для предсказания его электронных и оптических свойств.
10. Высокопроизводительный компьютерный скрининг для выявления перспективных материалов для конкретных применений.
11. Моделирование поведения материалов на атомарном уровне для оценки влияния различных условий синтеза на свойства материала.
12. Оптимизация условий синтеза материалов.

¹ “Where Will Quantum Computers Create Value – and When?” May 2019
<https://www.bcg.com/publications/2019/quantum-computers-create-value-when>

Квантовые алгоритмы для материаловедения



¹ Bauer, Bela, Sergey Bravyi, Mario Motta and Garnet Kin-Lic Chan. "Quantum Algorithms for Quantum Chemistry and Quantum Materials Science." Chemical reviews (2020): n. Pag.

² <https://arxiv.org/pdf/2001.03685>

³ <https://quantumzeitgeist.com/indian-physicists-simulate-11-dimensional-quantum-field-theory-on-ibm-quantum-computer/>

⁴ <https://quantumzeitgeist.com/quantum-computing-for-quantum-chemistry-simulating-molecular-reactions/>

⁵ Gayday, Igor, Dmitri Babikov, Alexander Teplukhin, Brian K. Kendrick, Susan M. Mniszewski, Yu Zhang, Sergei Tretiak and Pavel A. Dub. "Molecular dynamics on quantum annealers." Scientific Reports 12 (2021): n. Pag. <https://arxiv.org/abs/2110.12096>

⁶ S. E. Borujeni, R. Harikrishnakumar and S. Nannapaneni, "Quantum Grover search-based optimization for innovative material discovery," 2019 IEEE International Conference on Big Data (Big Data), Los Angeles, CA, USA, 2019, pp. 4486-4489 <https://soar.wichita.edu/items/ecd25902-d715-4378-8301-a1d983d0116c>

⁷ Vinod, Gayathree M. and Anil Shaji. "Simulating Quantum Field Theories on Gate-Based Quantum Computers." IEEE Transactions on Quantum Engineering 5 (2024): 1-14. <https://arxiv.org/pdf/2401.04496>

Открытое программное обеспечение для моделирования материалов на квантовых компьютерах

| Программное обеспечение | Разработчик | Заслуживающие внимания атрибуты |
|-------------------------------------|-------------|---|
| Quantum Development Kit | Microsoft | Библиотека квантовой химии для легкой интеграции с NWChem |
| Openfermion | Google | Специализированная структура данных, функции и интерфейсы для расчетов электронной структуры |
| Qiskit Aqua | IBM | Вычисления энергии основного состояния, возбужденных состояний и дипольных моментов. Интеграция с квантовым компьютером IBM |
| Grove | Rigetti | Алгоритмы VQE и QPE для квантово-химического моделирования. Интеграция с квантовым компьютером Rigetti |
| PennyLane | Xanadu | Методы VQE, термического состояния вещества, вычисления вибрационного спектра молекул |
| XACC | ORNL | Методы VQE, QPE, а также моделирование изменений переменных вещественной и мнимой составляющих |
| MISTIQS | USC | Библиотека по модели Гейзенберга |
| ArQTiC | LBNL | Библиотека расчетов материалов сверхнизких температур с помощью спиновых решеток |
| Библиотека квантовых вычислений РКЦ | РКЦ | Библиотека решения задач оценки электронной структуры молекул на основе адаптивного вариационного квантового решателя собственных значений (ADAPT-VQE) ¹ |

Российский квантовый центр совместно с Куборд (ООО «Облачные квантовые технологии») разработали библиотеку квантовых вычислений для квантовой химии^{8–10}

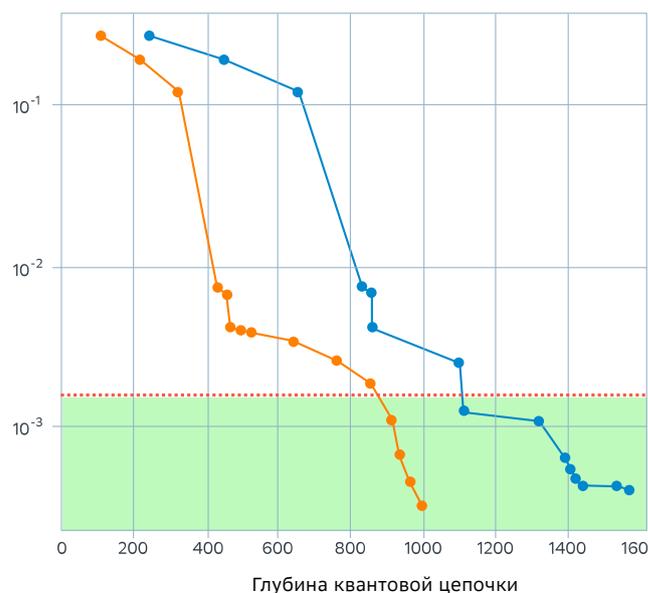
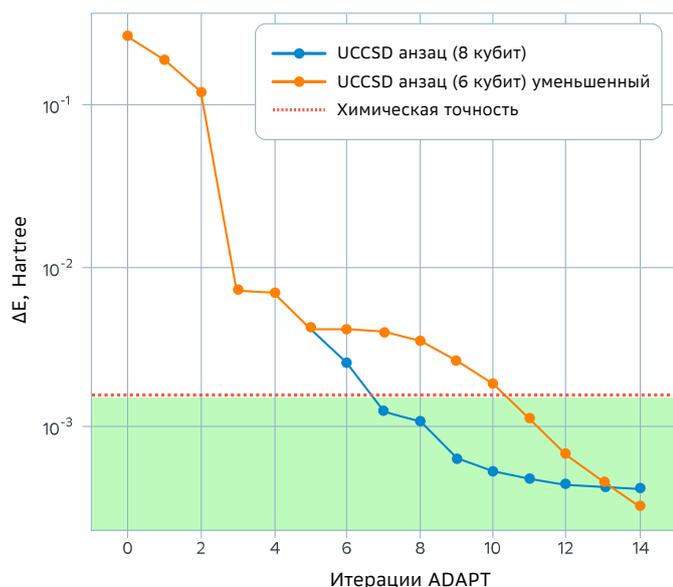
Реализованы и описаны алгоритмы квантовой химии в виде библиотеки на Python, основной целью которой является ускорение разработки вариационных квантовых алгоритмов для решения задач оценки электронной структуры молекул. Разработан адаптивный вариационный квантовый решатель собственных значений (ADAPT-VQE), который расширяет алгоритм VQE за счет использования адаптивной процедуры и оптимизации начального представления данных. Библиотека облегчает интеграцию классических и квантовых вычислений и помогает реализовать перекрестную проверку данных с помощью традиционных вычислительных методов, повышая общую надежность квантово-химического моделирования.

⁸ <https://dvizhok.su/business/nissan-zapuskaet-sovmestnyj-proekt-s-rossijskim-kvantovym-centrom?ysclid=m3y3kw5q6l952477393>

⁹ Демонстрация на форуме будущих технологий <https://future-forum.tech/about/>

¹⁰ Sapova, Mariia D and Aleksey K. Fedorov. "Variational quantum eigensolver techniques for simulating carbon monoxide oxidation." Communications Physics 5 (2021): 1-13. <https://arxiv.org/abs/2108.11167>

Молекула LiH



ADAPT-VQE значение расхождения расчета энергии ΔE с точным значением в основном состоянии в зависимости от количества параметров и глубины цепочки для молекулы LiH.

Использование платформы моделирования QriAI-Sim для поиска материалов следующего поколения

Платформа QriAI эффективного проектирования и навигации по огромным массивам данных о химических веществах оснащена инструментами, использующими искусственный интеллект и квантовые вычисления для ускорения поиска материалов и молекул нового поколения. Расчеты с использованием платформы для масштабирования химических расчетов QriAI-Sim-Force, одного из продуктов компании **QriAI**, позволяют масштабировать высокоточное моделирование и обеспечивают ускорение в 100 000 раз по сравнению с традиционными методами комбинаторного комплексного моделирования диффузии и в 1000 раз по сравнению с методами теории функционала плотности.

Платформа **квантовых вычислений Microsoft Azure Quantum Elements для материаловедения** готова к работе с квантовыми компьютерами и предназначена для анализа конфигурации атомов, которые могут образовывать молекулы, способные стать новыми материалами или веществами. Программное обеспечение для искусственного интеллекта и машинного обучения также будет частью системы Azure Quantum Elements. Ученые могут ввести в обученную модель типы и расположение атомов в молекуле и ИИ спрогнозирует их энергию и взаимодействие.



Обзор применений квантовых
вычислений для решения
задач по дизайну новых
материалов

1. Конструкционные и композиционные материалы с улучшенными свойствами

Квантовые вычисления для ингибирования коррозии

Эффект

Эффективное управление и снижение степени износа поверхности для продления срока службы и повышения эффективности эксплуатации продукции Airbus и BMW Group.

Заказчик

Airbus, BMW Group

Исполнитель

Amazon Web Services

Airbus совместно с BMW Group запустили в 2024 году проект Quantum Mobility Quest — глобальную инициативу по разработке технологий квантовых вычислений для авиационного и автомобильного сектора¹. Одна из задач инициативы направлена на разработку интеллектуальных покрытий транспорта с помощью методов квантовой химии на квантовом компьютере.

Предлагаемая постановка задачи состоит в моделировании адсорбции выбранной молекулы ингибитора коррозии на поверхности алюминия.

Квантовые вычисления и тензорные сети для слоистых композиционных материалов

Эффект

Численное моделирование многослойных композиционных материалов с помощью квантового алгоритма и алгоритма на тензорных сетях успешно привели к получению приближенных решений, продемонстрировав при этом компромисс между точностью и временем выполнения.

Характеристики жесткости всего материала могут быть адаптированы к конкретным требованиям конструкции по соотношению прочности и веса, что характерно для аэрокосмической промышленности.

Исследователи разработали метод квантового поиска последовательности укладки композиционных материалов с параметрами ламинирования.

Метод проектирования композитных конструкций двухуровневый: оптимизация с помощью непрерывного градиентного спуска характеристик толщины и жесткости материала, выраженных через параметры ламинирования, и поиск приемлемой последовательности укладки ламинирования с помощью квантового отжига с учетом производственных ограничений.

Заказчик

Airbus-BMW

Исполнитель

Технологический университет Делфта в Нидерландах²⁻⁴

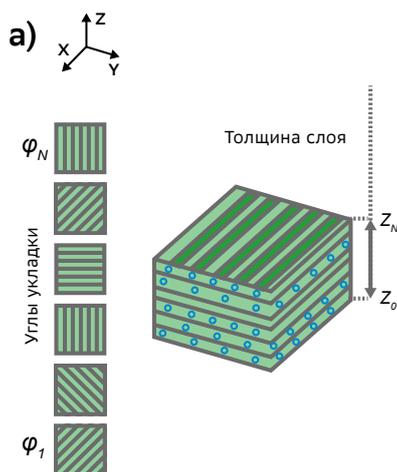
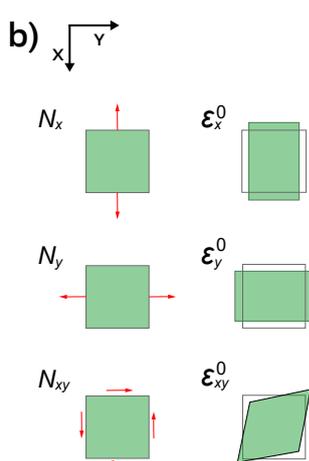
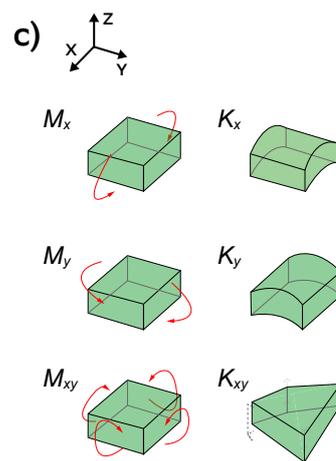


Диаграмма слоистого композиционного материала, состоящего из множества слоев, ориентированных в разных направлениях



Представление результирующих напряжений, которые для изотропных материалов приводят к деформациям в плоскости



Графическое представление результирующих моментов, которые для изотропных материалов приводят к изгибу вне плоскости

¹ QCChallenge_QSIM_AirbusBMWGroup_v1.1.pdf (thequantuminsider.com)

² Wulff, Arne, Boyang Chen, Matthew Steinberg, Yinglu Tang, Matthias Möller and Sebastian Feld. "Quantum Computing and Tensor Networks for Laminate Design: A Novel Approach to Stacking Sequence Retrieval." ArXiv abs/2402.06455 (2024): n. Pag.

³ <https://quantumzeitgeist.com/delft-university-team-utilizes-quantum-computing-for-optimized-laminate-design/>

⁴ <https://www.tudelft.nl/en/2024/lr/can-quantum-computers-solve-an-old-riddle-in-composites-design>

Моделирование процессов коррозии для улучшения композитов

Эффект

Удалось вычислить энергии, участвующие в реакции восстановления воды, гораздо точнее, чем при использовании ведущих классических методов. Исследователи разработали потенциально ценный новый метод для точного и автоматизированного упрощения квантовых схем, значительно сокращающий квантовые ресурсы при моделировании.

Заказчик

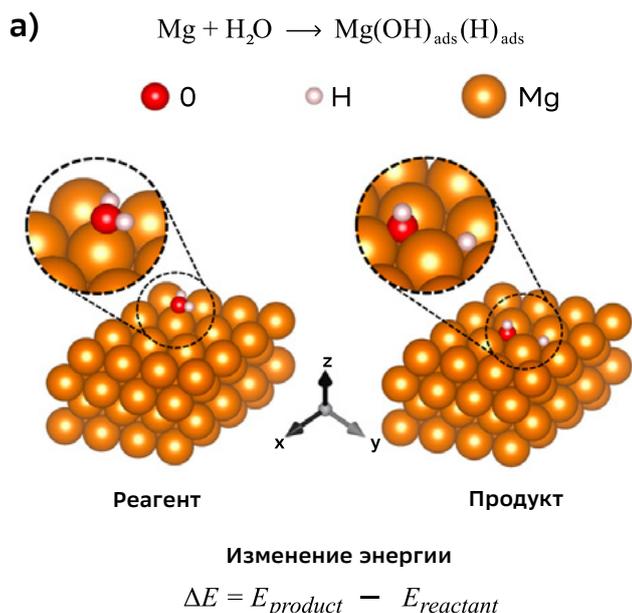
Boeing

Исполнитель

IBM

IBM сообщила о работе с Boeing по моделированию процессов коррозии для улучшения композитов, используемых в корпусах самолетов. В данном случае целью является борьба с ржавчиной⁵⁻⁷ или коррозионным воздействием в присутствии агрессивного электролита на поверхности транспортных средств, когда они работают во влажной среде.

Работа проводилась с использованием квантового компьютера IBM и классических систем. Исследователи разработали метод встраивания реакций молекул на поверхностях и метод упрощения квантовой цепочки для квантового моделирования процесса коррозии, известного как восстановление воды.



Описание химической реакции и процесса вычислений



Инициатива Немецкого космического агентства по разработке методов квантовых вычислений для материаловедения

Эффект

В результате инициативы QuantiCoM⁸ будут получены методы квантовых вычислений для быстрого обнаружения и разработки новых материалов, что позволит в будущем значительно сократить время разработки. Предполагается, что оптимизация контроля качества при разработке новых сплавов на основе переработанных материалов с использованием квантовых вычислений будет поощрять промышленность к использованию отходов двигателей внутреннего сгорания, их вторичной переработки и повторного использования.

Заказчик

d-fine, IQM Deutschland, ParityQC

Исполнитель

DLR (Немецкое космическое агентство)

В рамках конкурса проектов QuantiCoM: Quantum Computing for Materials Science and Engineering по разработке материалов с помощью квантовых вычислений будут определены задачи материаловедения, от которых можно ожидать квантового преимущества. На данном этапе на основе расчета фазовых диаграмм разрабатываются алгоритмы расчетов контроля качества новых материалов, которые позволят повысить производительность систем, моделирующих более 1000 атомов. Изучается также стабильность соединений, которые способствуют оптимизации процессов предварительной и термической обработки.

⁵ Rust Busting: IBM and Boeing Battle Corrosion with Simulations on Quantum Computer (hpcwire.com)

⁶ <https://research.ibm.com/blog/boeing-quantum-corrosion>

⁷ https://www.nature.com/articles/s41534-023-00753-1.epdf?sharing_token=BaGL3KAtVP7f2AUqc5YUt9RgN0AjWel9jnR3ZoTv0MzxNluj-XaUgEeODtnNwbH8eQ8Ki uHwe9jF0E92UsLMTmq3czaRrLP5MEW3FfMjg-TfprHsLMhZJsHxrkqEMBoG5S27S1V jIPJyV5C2hJ_qpZHVMSR8lqVqEgctlqy9s%3D

⁸ <https://qci.dlr.de/en/quanticom/>

2. Углеродные наноматериалы

Вычисление энергии вакансий графена с помощью квантового отжига

Эффект

Модель квантового отжига использована для определения низкоэнергетического состояния молекулярной системы графена, характеризующейся несколькими состояниями, близкими по энергии. На компьютере D-Wave в виде библиотеки Python реализованы функции отображения и постобработки структуры материалов, полезные специалистам по химии материалов.

Заказчик

Научно-исследовательский совет по инженерным и физическим наукам Великобритании

Исполнитель

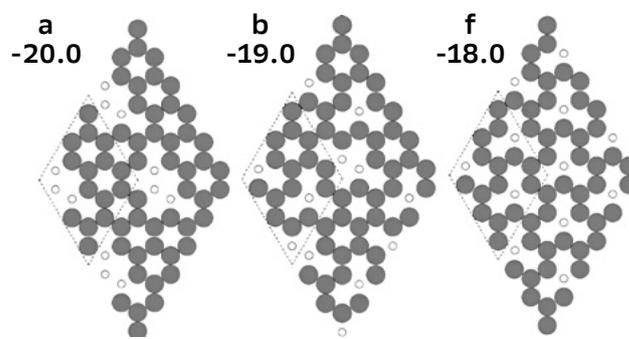
Университетский колледж Лондона

Коллективом ученых проведена аналогия между классическими и квантовыми процессами в химии материалов, основанных на вычислении энергии молекулярной системы с помощью гамильтониана. В качестве тестовой модели использовалась идентификация¹ вакансий в графеновых структурах с наименьшей энергией. Процесс был разбит на различные компоненты, подходящие для квантового отжига и вычислений на квантовом компьютере.



Процесс по вычислительной химии материалов для классических компьютеров

Процесс по вычислительной химии материалов для квантовых компьютеров. Вектор x представляет конфигурацию системы с наименьшим энергопотреблением



¹ B. Camino, J. Buckeridge, P. A. Warburton, V. Kendon, S. M. Woodley; Quantum computing and materials science: A practical guide to applying quantum annealing to the configurational analysis of materials. J. Appl. Phys. 14 June 2023; 133 (22): 221102. <https://pubs.aip.org/aip/jap/article/133/22/221102/2896017/Quantum-computing-and-materials-science-A>

3. Материалы для аддитивного производства

Квантовое машинное обучение для мониторинга результатов аддитивного производства

Эффект

Результаты показывают, что квантовое машинное обучение может достигать таких же уровней точности предсказаний, как и аналоги классического машинного обучения, но с экспоненциально меньшим количеством параметров.

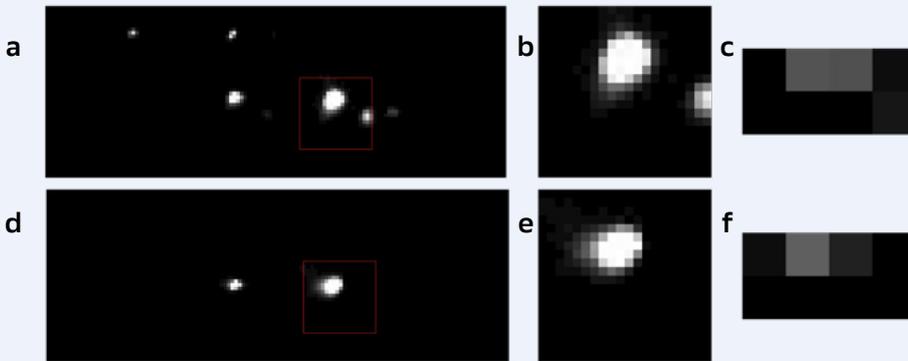
Заказчик

Инициативное исследование

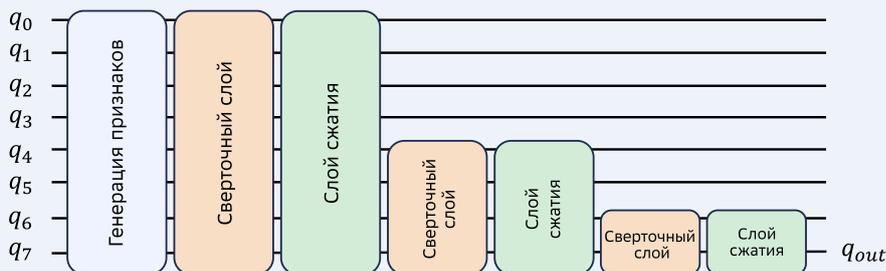
Исполнитель

Georgia Institute of Technology.

Предложена стратегия квантового машинного обучения для мониторинга аддитивного производства². Квантовый метод опорных векторов применяется для определения состояния оборудования в процессе изготовления плавящихся нитей на основе данных акустической эмиссии. Квантовая сверточная нейронная сеть используется для обнаружения брызг в процессе лазерного наплавления порошкового слоя на основе коаксиальных оптических изображений.



Изображения для детектирования брызг в процессе лазерного плавления слоя порошка. Изображения 20 x 20 пикселей выделяются из оригинальных 128 x 48 изображений и затем переводятся в размер 4 x 2 для прогноза: есть брызги, нет брызг.



Структура конволюционной нейронной сети из 8-ми кубит с конволюционными слоями

² Eunsik Choia et al., Quantum Machine Learning for Additive Manufacturing Process Monitoring, Manufacturing Letters 00 (2023) 000–000 52nd SME North American Manufacturing Research Conference (NAMRC 52, 2024) https://msse.gatech.edu/publication/QML_manufacturing_NAMRC2024.pdf

4. Новые материалы для электроники

Квантовые вычисления для новых материалов дисплеев

Эффект

Моделирование электронной структуры, колебательных спектров и молекулярной динамики с использованием квантового моделирования и уникальной архитектурой квантовой коррекции ошибок позволяет снизить потребление мощности при работе камеры и дисплея, интегрировать датчики в дисплей и повысить разрешение экрана.

Метод использует гораздо меньшее количество кубитов, чем конкурирующие разработки.

Заказчик

OTI Lumionics

Исполнитель

Nord Quantique/NGen

Компании работают над расчетами электронной структуры, колебательными спектрами и молекулярной динамикой *ab initio* (AIMD) с использованием квантового моделирования при разработке передовых материалов дисплеев^{1,2}.

Создание моделей OLED-источников света с потенциалом 100%-ной внутренней эффективности

Эффект

Современные источники света обладают внутренней КПД до 25%. Используя квантовые вычисления IBM, JSR Corporation и Mitsubishi объединили усилия для создания моделей OLED-источников света с потенциалом 100%-ной внутренней эффективности.

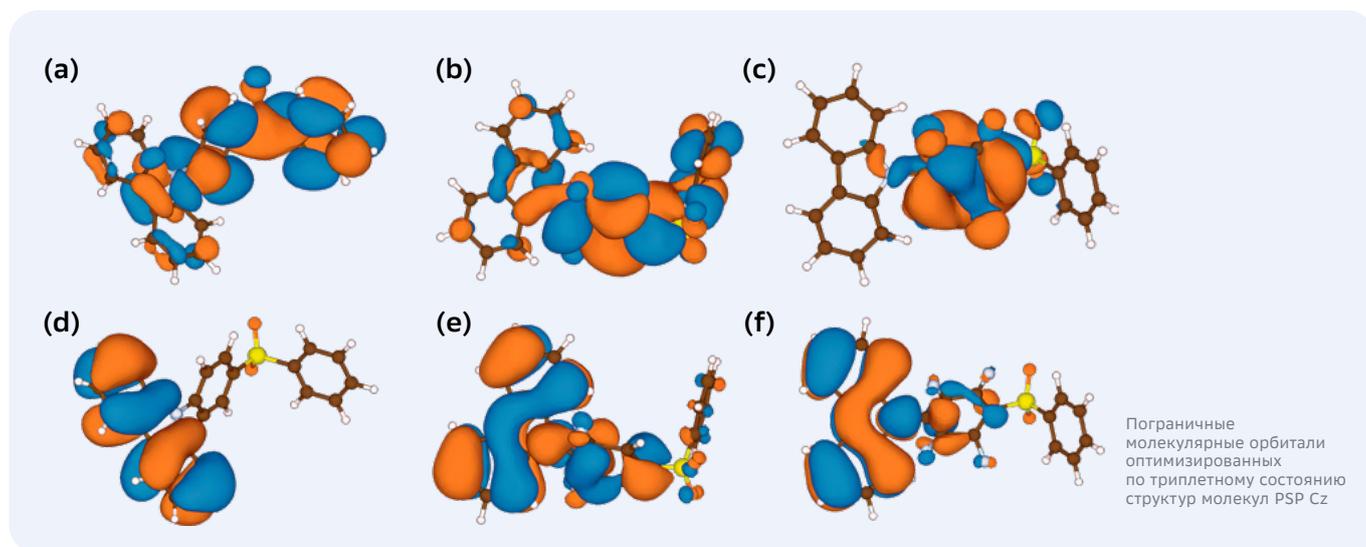
Заказчик

JSR Corporation, Mitsubishi

Исполнитель

IBM

Проведено квантово-химическое исследование первых синглетных и триплетных возбужденных состояний соединений, предложенных в качестве полезных термоактивируемых излучателей замедленной флуоресценции для органических светодиодов (OLED)^{3,4}. Исследование реализовано с помощью вариационного квантового решателя собственных уравнений движения (qEOM-VQE) и алгоритма вариационной квантовой дефляции (VQD) на квантовых симуляторах и квантовом компьютере. Обнаружено, что различия в разделении энергий между синглетными и триплетными возбужденными состояниями, предсказанные расчетами на квантовых симуляторах, находятся в отличном согласии с экспериментальными данными.



¹ <https://thequantuminsider.com/2024/06/12/oti-lumionics-selects-nord-quantique-to-test-new-quantum-computing-applications-for-materials-science/>

² <https://www.oled-info.com/oti-lumionics-and-nord-quantique-collaborate-oled-material-discovery-using>

³ <https://www.ibm.com/downloads/cas/6PRYZJLV>
Gao, Qi, et al. "Applications of quantum computing for investigations of electronic transitions in phenylsulfonyl-carbazole TADF emitters." *Computational Materials*. May 20, 2021.

⁴ <https://www.nature.com/articles/s41524-021-00540-6>

5. Новые материалы для агропрома и пищевой промышленности

Моделирование полимеров с помощью квантового отжига

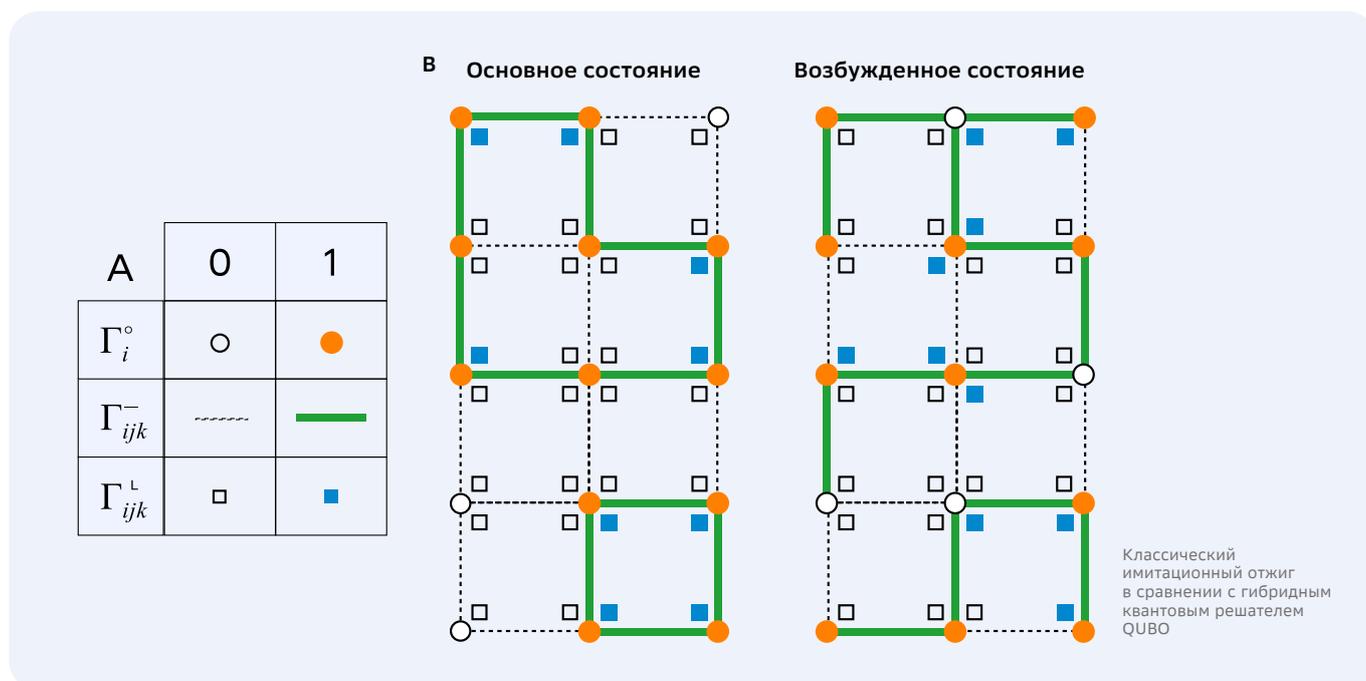
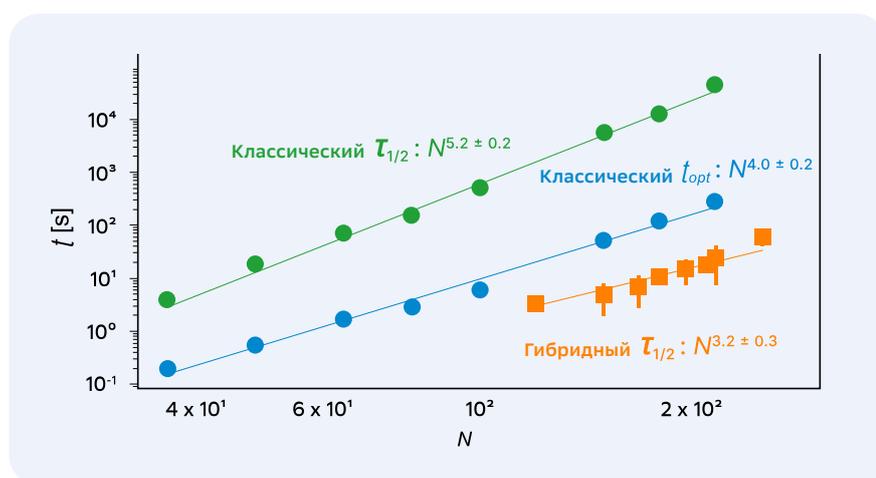
Эффект

Квантовые компьютеры с квантовым отжигом позволили повысить производительность моделирования полимеров по сравнению с традиционными методами в 10 раз для размерности полимера 200 молекул. Подход оказался эффективным даже при реализации на обычных компьютерах на симуляторах, позволив исследователям обнаружить свойства моделируемых смесей полимеров.

В исследовании моделировались радикально новые плотные полимерные смеси – сложные физические системы, занимающие центральное место в биологии и материаловедении^{5,6}. Алгоритм является реализацией задачи молекулярного моделирования решетки с учетом взаимодействия между молекулами с помощью устройства квантового отжига на компьютере D-Wave.

Заказчик

Международная школа передовых исследований Италии (SISSA) в Триесте, Университет Тренто, Университет Милан-Бикокка



⁵ “Quantum-inspired encoding enhances stochastic sampling of soft matter systems” by Francesco Slongo, Philipp Hauke, Pietro Faccioli and Cristian Micheletti, 25 October 2023, Science Advances. <https://www.science.org/doi/10.1126/sciadv.adi0204>

⁶ <https://scitechdaily.com/quantum-leap-the-new-frontier-of-polymer-simulations/>

6. Новые материалы и нанотехнологии для энергетики

Квантовые вычисления для разработки аккумуляторных батарей

Эффект

Материалы, которые можно будет создать с помощью квантовых компьютеров, существенно увеличат энергоемкость и мощность батарей. В итоге появится возможность создавать высокоэффективный и экологичный транспорт, а также новые решения.

Использование квантовых технологий позволит сократить время на разработку новых материалов и даст возможность прогнозировать их соответствие запросам индустрии и бизнеса.

Заказчик

NISSAN

Исполнитель

Российский квантовый центр

Используя специально разработанную библиотеку квантовой химии исследователи замоделировали литий, водород, другие химические элементы и апробировали моделирование химической реакции на основе метода ADAPT-VQE – гибридного квантового метода моделирования^{1,2}.



Схема выращивания анзаца в оригинальной и дозированной версии ADAPT-VQE

Использование квантового компьютера для определения молекулярного кандидата для более эффективных солнечных элементов

Эффект

Смоделированы материалы, обладающие синглетным делением, способные преодолеть предел 33% максимального КПД солнечных элементов.

В ходе исследования с помощью метода сужения кубитов, однократного измерения групп и запуска четырех схем параллельно снижена вычислительная нагрузка, что сократило время на ее решение с нескольких месяцев до нескольких недель и позволило использовать все 20 кубитов в H1-1.

Заказчик

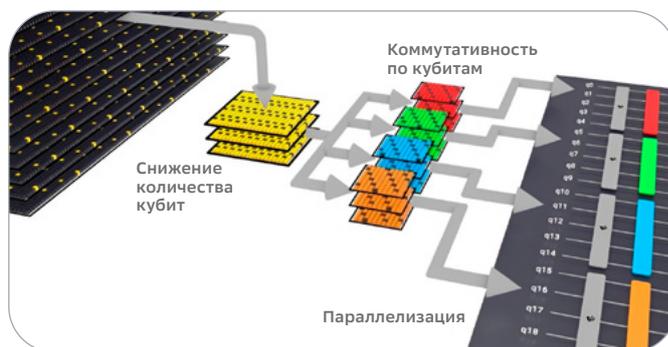
Управление науки, Управление фундаментальных энергетических наук, Департамент управления наукой, Управление фундаментальных энергетических наук, Департамент химии, наук о Земле и биологических наук Министерства энергетики США

Исполнитель

Окриджская национальная лаборатория Министерства энергетики США, Тихоокеанская Северо-Западная национальная лаборатория

Используя возможности квантового компьютера Quantinuum H1-1, исследователи смоделировали синглетное деление молекул – явление в молекулах с несколькими энергетическими состояниями и подтвердили, что энергетические уровни смоделированной линейной молекулы H4, состоящей из четырех атомов водорода, соответствуют требованиям процесса деления^{3,4}.

Команда ORNL использовала квантовый решатель, основанный на подходе Питерса-Девриза-Солдатова (PDS) и разработанный в Тихоокеанской Северо-Западной национальной лаборатории.



Графическое представление протокола сокращения измерений

¹ Sapova M.D., Fedorov A.K. Variational quantum eigensolver techniques for simulating carbon monoxide oxidation. Commun Phys 5, 199 (2022). <https://doi.org/10.1038/s42005-022-00982-4>

² Nissan запускает совместный проект с Российским квантовым центром - Журнал Движок. <https://dvizhok.su/business/nissan-zapuskaet-sovmestnyiy-proekt-s-rossijskim-kvantovym-czentrrom?ysclid=m3y3kw5q6l952477393>

³ Daniel Claudino et al, Modeling Singlet Fission on a Quantum Computer, The Journal of Physical Chemistry Letters (2023).

⁴ <https://www.hpcwire.com/off-the-wire/researchers-use-commercial-quantum-computer-to-identify-singlet-fission-molecules-for-efficient-solar-cells/>

Квантовый алгоритм для вибронной динамики: практическое исследование конструкции синглетного солнечного элемента с расщеплением

Эффект

Вибронные взаимодействия между движением ядра и электронными состояниями имеют решающее значение для точного моделирования фотохимии. Однако точное моделирование полностью квантовой неадиабатической динамики часто является дорогостоящим для классических методов, за исключением небольших систем. Разработана первая схема троттеризации для вибронных гамильтонианов и внедрено множество методов оптимизации для возведения в степень каждого фрагмента в формуле продукта, что приводит к удивительно низкой стоимости внедрения.

Заказчик

Канадский совет по естественным наукам и инженерным исследованиям (NSERC)

Исполнитель

Xanadu

В работе представлен квантовый алгоритм, основанный на формулах моделирования временной эволюции в рамках общего вибронного гамильтониана в реальном пространстве, способный обрабатывать произвольное число электронных состояний и колебательных режимов. Чтобы продемонстрировать практическую значимость, Дэниэл Мотлах описывает принципиальную интеграцию алгоритма в процессе поиска материалов для разработки более эффективных органических солнечных элементов на основе синглетного деления. Для моделирования взят элемент Anth/C60⁵.

Моделирование химических реакций в катализаторах топливных элементов

Эффект

Появляется возможность моделировать свойства материалов с соответствующей химической точностью при проектировании топливных элементов для экологически чистого транспорта, такого как самолет ZEROe для выхода на рынок к 2035 году.

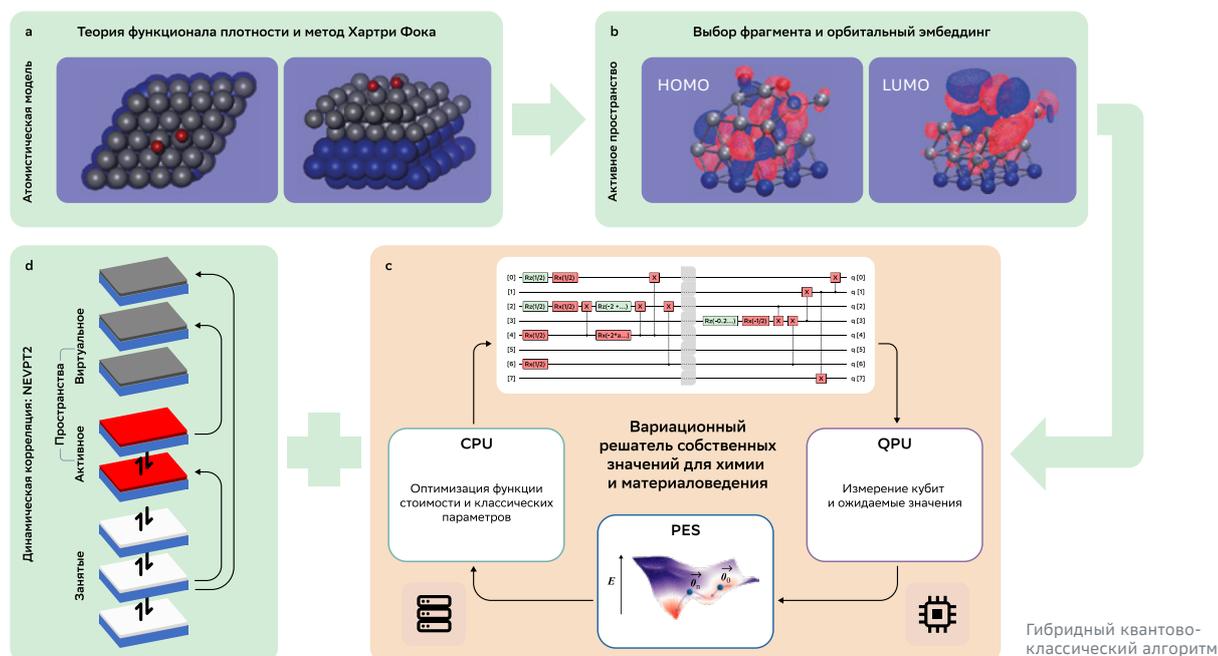
Заказчик

Airbus, BMW Group

Исполнитель

Quantinuum

Разработан гибридный квантово-классический алгоритм для моделирования химических реакций в катализаторах топливных элементов. Сообщают о точном моделировании с помощью квантового компьютера Quantinuum H реакции восстановления кислорода на поверхности катализатора на основе платины^{6,7}.



⁵ Danial Motlagh et al Quantum Algorithm for Vibronic Dynamics: Case Study on Singlet Fission Solar Cell Design <https://arxiv.org/pdf/2411.13669>

⁶ Paola, Cono di et al. "Platinum-based Catalysts for Oxygen Reduction Reaction simulated with a Quantum Computer." (2023). <https://arxiv.org/abs/2307.15823>

⁷ <https://www.h2-view.com/story/airbus-bmw-quantinuum-team-up-to-use-quantum-computing-to-improve-fuel-cell-efficiency/>

7. Биомиметические материалы и материалы медицинского назначения

Квантовые вычисления и сервисы Azure для разработки более экологичных красок

Эффект

Моделирование красок позволяет исследовать значительно больше потенциальных химических комбинаций без ограничений, связанных с традиционными лабораторными методами, такими как доступность сырья, ограниченность физического оборудования, токсичность и условия окружающей среды.

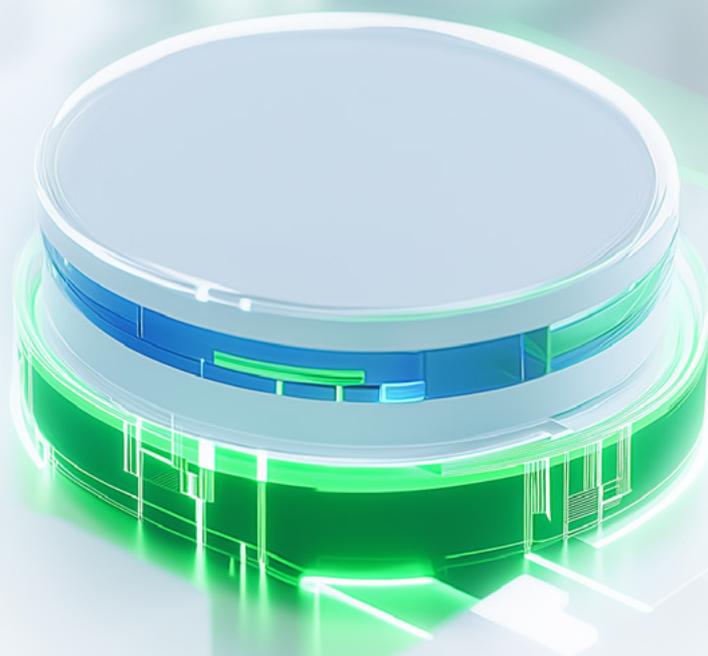
Заказчик

AkzoNobel

Исполнитель

Microsoft

Используя сервисы Azure и возможности квантовых вычислений, исследователи и разработчики из обеих компаний объединяются для создания эффективной облачной лабораторной среды, одним из применений которой является создание экологичной лакокрасочной продукции¹.



¹ <https://azure.microsoft.com/en-us/blog/quantum/2022/04/20/microsoft-and-akzonobel-to-explore-how-quantum-computing-and-azure-services-can-accelerate-development-of-more-sustainable-paints/>



Новые материалы
для квантовых вычислений

Новые материалы для квантовых вычислений

Если новые материалы – это широкий термин, который охватывает любые недавно разработанные или исследованные материалы, обладающие улучшенными или уникальными свойствами по сравнению с традиционными материалами, то квантовые материалы – это класс материалов, входящий в множество новых материалов, свойства которых в значительной степени определяются квантовыми свойствами.

Квантовые материалы могут использоваться в квантовых компьютерах для создания физической реализации кубита и других элементов.

К квантовым материалам относятся сверхпроводники, графен, топологические изоляторы, полуметаллы Вейля, дефектные алмазы, квантовые спиновые жидкости, спиновый лед. Многие из них обладают свойствами, обусловленными уменьшенной размерностью, в частности, двумерные слои. Более того, они, как правило, представляют собой материалы, в которых электроны нельзя рассматривать как независимые частицы, т.к. они сильно взаимодействуют и приводят к коллективным возбуждениям, известным как квазичастицы. Однако во всех случаях квантово-механические эффекты фундаментально изменяют макроскопические свойства материала.

Свойства квантовых материалов^{1–5}

| Наименование квантового материала | Свойства | Химическая формула |
|-----------------------------------|--|--|
| Сверхпроводники | Нулевое электрическое сопротивление, совершенный диамагнетизм | Нитрид кремния, оксид кремния, оксид алюминия, ниобий, алюминий, диселенид ниобия, графен, нитрид ниобия |
| Двумерные материалы | Высокая подвижность носителей, сверхпроводимость, хорошая теплопроводность | Графен, гексагональный нитрид бора, сульфид молибдена |
| Квантовые точки | Устойчивые энергетические уровни, зависимость от размера свойства | Арсенид алюминия-галлия, арсенид индия, фуллерен |
| Структуры с фермионами Майораны | Устойчивость к декогеренции | Нанопровода, арсенид индия-алюминия |
| Топологические изоляторы | Проводящие поверхностные состояния, изолирующий объем | Арсенид индия, антимонид индия, ниобий, индий-сурьма, арсенид галлия, квантовые ямы теллурида ртути, сплавы антимонида висмута, кристаллы теллурида висмута и селенида висмута |
| NV-центры в алмазе | Спиновые дефекты, большое время когерентности | Алмаз с примесями, карбид кремния |
| Полуметаллы Вейля и Дирака | Особая энергетическая структура («трехмерный графен») | Арсенид тантала, фосфид ниобия, теллурид молибдена, арсенид кадмия |

¹ Aguado, Ramon & Kouwenhoven, Leo. (2020). Majorana qubits for topological quantum computing. *Physics Today*. 73. 44-50. 10.1063/PT.3.4499. <https://pubs.aip.org/physicstoday/article/73/6/44/909657> Majorana-qubits-for-topological-quantum

² de Leon, Nathalie & Itoh, Kohei & Kim, Dohun & Mehta, Karan & Northup, Tracy & Paik, Hanhee & Palmer, B. & Samarth, N. & Sangtawesin, Sorawis & Steuerma, D.. (2021). Materials challenges and opportunities for quantum computing hardware. *Science*. 372. eabb2823. 10.1126/science.abb2823. <https://www.science.org/doi/10.1126/science.abb2823>

³ Materials advances are key to development of quantum hardware | Office of the Dean for Research (princeton.edu)

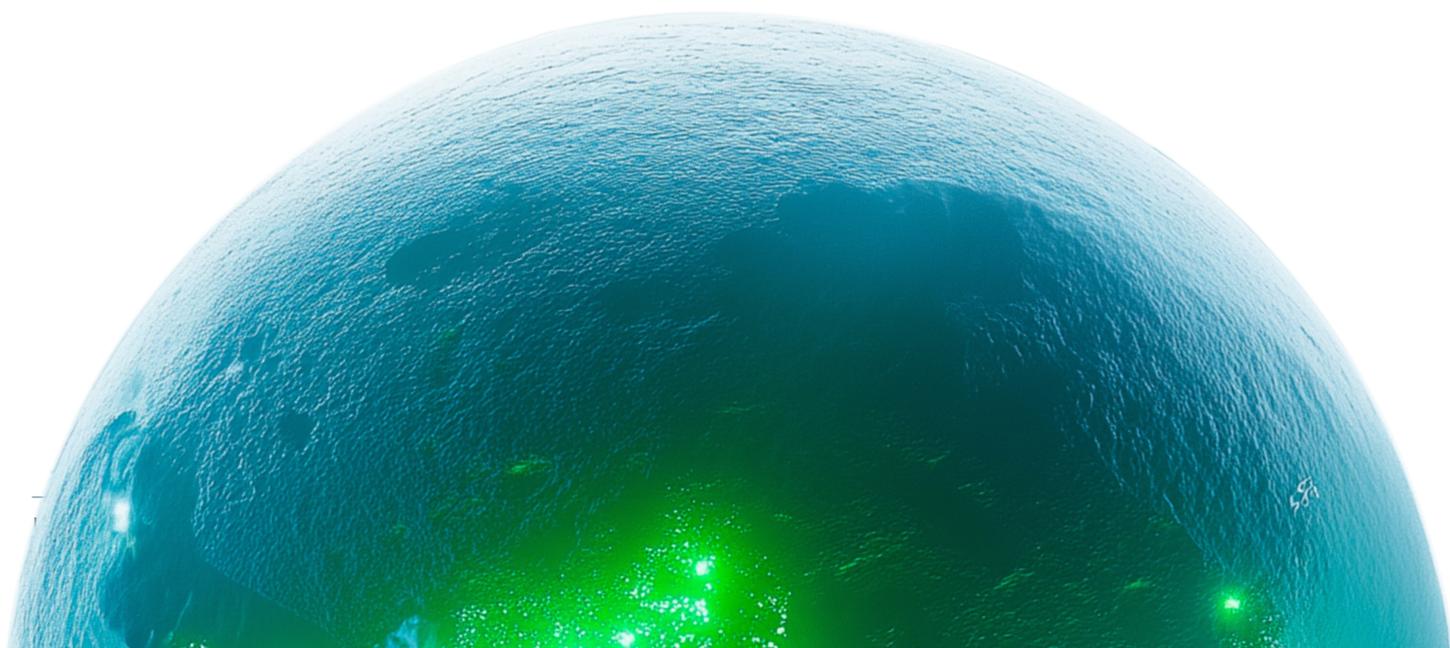
⁴ Liu, X., Hersam, M.C. 2D materials for quantum information science. *Nat Rev Mater* 4, 669–684 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41578-019-0136-x>

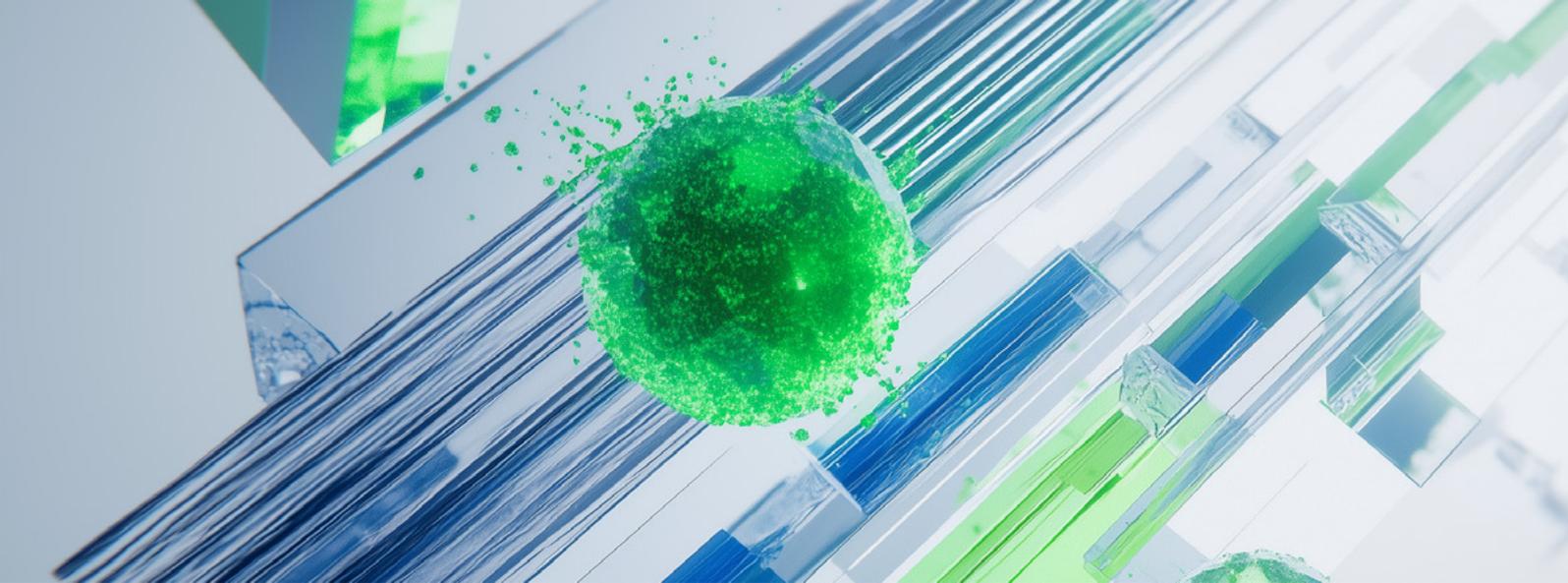
⁵ Armitage, N. & Mele, Eugene & Vishwanath, Ashvin. (2017). Weyl and Dirac Semimetals in Three Dimensional Solids. *Reviews of Modern Physics*. <https://arxiv.org/pdf/1705.01111>

Ключевые предпосылки и требования к квантовым материалам

| Предпосылка | Требования к материалам | Материалы |
|---|---|---|
| Увеличение когерентности | Квантовые системы должны сохранять свои квантовые состояния как можно дольше, минимизировать взаимодействие с окружающей средой и уменьшать декогеренцию | NV-центры в алмазе Структуры с фермионами Майораны |
| Развитие технологий сверхпроводимости | Квантовые технологии, такие как сверхпроводящие кубиты, требуют работы при очень низких температурах и должны сохранять свои свойства | Новые сверхпроводники Двумерные материалы |
| Повышение устойчивости к ошибкам | В квантовых вычислениях возникают ошибки и материалы должны эффективно с ними справляться, обеспечивая высокую степень защиты квантовой информации | Квантовые точки |
| Повышение скорости и эффективности квантовых вычислений | Квантовые вычисления должны обладать более высоким быстродействием, чем в классических компьютерах, и обеспечиваться эффективным управлением квантовыми состояниями | Двумерные материалы Топологические изоляторы |
| Возросший спрос и возможности масштабируемости | Необходимость в масштабируемых решениях с обеспечением множество одновременно работающих кубит | Квантовые точки |

Эти предпосылки подчеркивают важность междисциплинарного подхода к разработке новых материалов для квантовых вычислений, объединяющего физику, химию, материаловедение и инженерные науки.





Направления применения новых материалов для индустрии квантовых вычислений

Физические основы разных типов квантовых компьютеров

Выбор применений новых материалов для квантовых компьютеров обусловлен их физической архитектурой: набором входящих элементов и физическими принципами.

Сверхпроводниковые квантовые компьютеры

Используют сверхпроводящие цепи, в которых ток может течь без сопротивления. Кубит представляет собой сверхпроводящий электрический колебательный контур с нелинейностью за счёт Джозефсоновского перехода. Сверхпроводящие кубиты управляются с помощью микроволновых импульсов, что позволяет выполнять квантовые операции.

Ионные квантовые компьютеры

Используются ионы, захваченные с помощью электромагнитного поля в электромагнитном поле ловушки Пауля. Для реализации кубита используются различные энергетические уровни иона. Для управления состоянием ионов используются лазеры. Измерение квантового состояния реализуется за счет физического эффекта излучения фотонов при переходе иона на контрольный энергетический уровень. Для детектирования перехода используются фотоэлектронный умножитель либо оптическая камера.

Атомные квантовые компьютеры

Используются ультрахолодные атомы (10-100 мкК), которые загружаются в массивы оптических пинцетов. Состояния кубита — долгоживущие сверхтонкие подуровни основного состояния атомов. Инициализация начального состояния осуществляется с помощью оптической накачки. Переходы между уровнями индуцируются лазерным излучением. Измерение конечного состояния регистра реализуется методом резонансной флуоресценции и оптической камеры.

Джозефсоновский переход — явление протекания сверхпроводящего тока через тонкий слой диэлектрика, разделяющий два сверхпроводника

Компьютер на квантовых точках

Квантовые точки представляют собой искусственные атомоподобные наноструктурные элементы с конечным числом дискретных энергетических уровней. Размер квантовой точки должен быть настолько мал, чтобы квантовые эффекты были существенными. Электрон в квантовой точке может быть возбуждён до состояния с более высокой энергией с помощью внешних полей. В качестве кубита также может быть использовано направление электронного и/или ядерного спина в данной квантовой точке.

Компьютер на квантовом отжиге

Использует системы, которые могут адекватно следовать за изменениями внешних параметров. Рабочая температура сверхпроводниковых чипов в аппаратах D-Wave составляет около 20 мК, имеется тщательное экранирование от внешних электрических и магнитных полей. Принцип работы основывается на адиабатической теореме, суть которой заключается в том, что при достаточно медленном изменении внешних условий квантовая система адаптирует свою конфигурацию, однако при быстром переходе, пространственная плотность вероятности остаётся неизменной. Это позволяет находить минимумы функции потерь и решать задачи оптимизации. Кубитом является сверхпроводящий поток пар электронов.

Топологические квантовые компьютеры

Теоретический квантовый компьютер, предложенный российско-американским физиком А. Китаевым в 1997 году. Использует квазичастицы в двумерных системах, называемые анионами. Они образуют логические кубиты.

Также реализуется концепция с использованием полупроводников из арсенида галлия при температуре, близкой к абсолютному нулю, и под воздействием сильных магнитных полей. Кубиты – топологические экситоны или майораны, которые хранят информацию в топологических состояниях.

Оптические квантовые компьютеры

Используют фотонные кубиты, создаваемые и манипулируемые с помощью различных оптических элементов (линз, отражателей). Квантовая информация кодируется в свойствах фотонов (например, поляризации). Квантовые операции выполняются с использованием интерферометров и других оптических компонентов.

Направления применения новых материалов в индустрии квантовых вычислений

| Направление применение | Обоснование |
|---------------------------------------|--|
| Сверхпроводящие кубиты | Сверхпроводящие материалы для создания кубитов, которые обладают высокой когерентностью и низким уровнем шума |
| Топологические кубиты | Топологические изоляторы и двумерные материалы для реализации кубитов, устойчивых к декогеренции |
| Кубиты на квантовых точках | Полупроводниковые нанокристаллы для компактного хранения и обработки квантовой информации |
| Оптические квантовые технологии | Материалы для оптических интегральных схем со сверхнизкими потерями, материалы с большим электрооптическим коэффициентом, тонкие сверхпроводящие наноструктурированные плёнки для детекторов одиночных фотонов |
| Детекторы квантовых состояний кубитов | Новые материалы для создания высокочувствительных сенсоров, которые могут использовать квантовые эффекты для измерения физических величин с высокой точностью |

Процесс разработки материалов для квантовых компьютеров



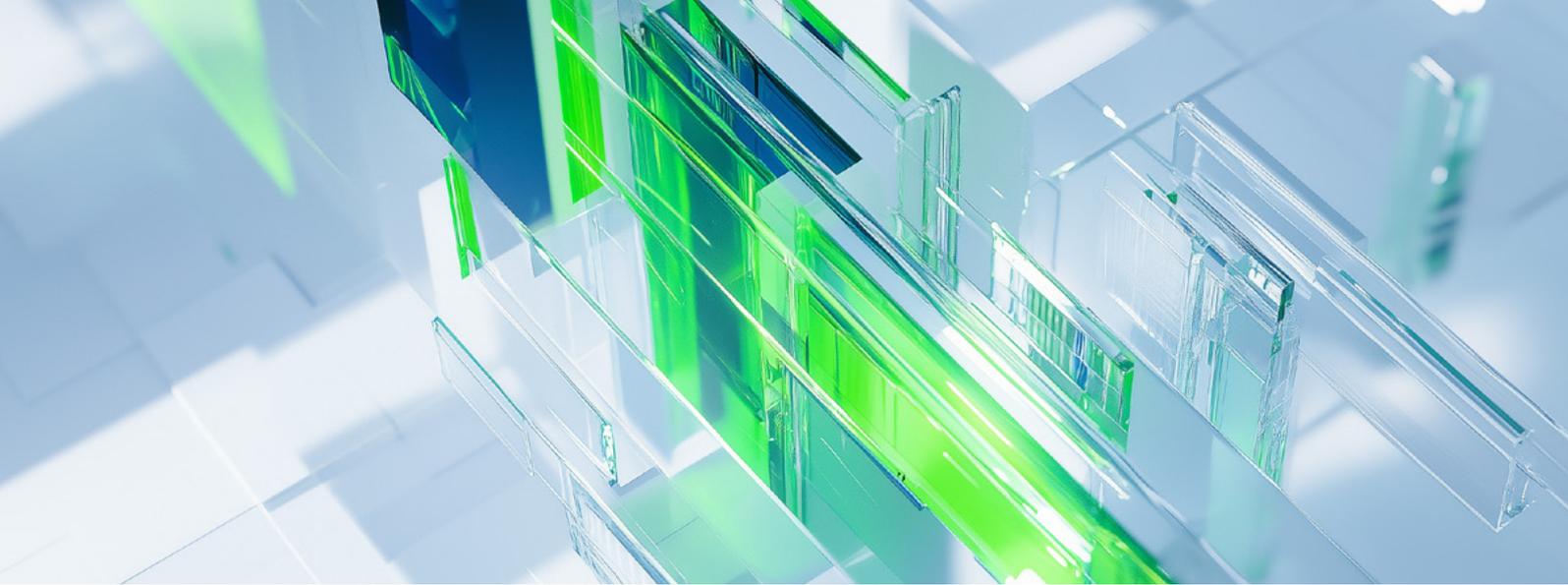
Обзор научно-технологических трендов по применению новых материалов

Один из трендов, которые хотелось бы отметить — это возможное использование в квантовых компьютерах двумерных материалов, в частности, графена, а также нанопроводов. В таблице представлены возможные применения двумерных материалов для реализации кубитов.

| Тип кубита | Физический кубит | Материал |
|---------------------------|--|--|
| Кубит на квантовых точках | Состояния спина захваченных зарядов, состояние электрона | Кремний, германий |
| Сверхпроводящие кубиты | Количество куперовских пар, протунелировавших через Джозефсоновское соединение | Диселенид ниобия, графен, нитрид ниобия |
| Топологические кубиты | Состояние фермионов Майораны | Арсенид индия-алюминия, арсенид галия ^{1,2} |

¹ Liu, X., Hersam, M.C. 2D materials for quantum information science. Nat Rev Mater 4, 669–684 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41578-019-0136-x>

² Aghaee, Morteza et al. (2022). InAs-Al Hybrid Devices Passing the Topological Gap Protocol. 10.48550/ARXIV.2207.02472. <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.107.245423>



Исследования квантовых материалов в мире

 **США**
2 из 5 квантовых центров NQI (National Quantum Initiative) ведут исследования квантовых материалов

 **Fermilab**
The Superconducting Quantum Materials and Systems Center
Сверхпроводниковые материалы и кубиты

 **OAK RIDGE National Laboratory**
Quantum Science Center
Топологические материалы

 **Microsoft**
Microsoft
Топологические кубиты на фермионах Майораны, топологические материалы

 **Китай**
Специализированные центры по квантовым материалам

ICQM PKU
International Center for Quantum Materials
Сверхпроводники, 2D материалы, спинтроника

 **中科院强耦合量子材料物理重点实验室**
Key Laboratory of Strongly-Coupled Quantum Matter Physics, University of Science and Technology of China, Chinese Academy of Sciences
Key Laboratory of Strongly-Coupled Quantum Matter Physics
Сильно коррелированные материалы

 **Евросоюз**
Проекты в рамках Quantum Flagship EU

 **MATQu**
Materials for Quantum Computing
Сверхпроводниковые кубиты на 300мм пластинах

 **EQUAISE**
Enabling QUAntum Information by Scalability of Engineered quantum materials
Источники квантового света на 2D материалах

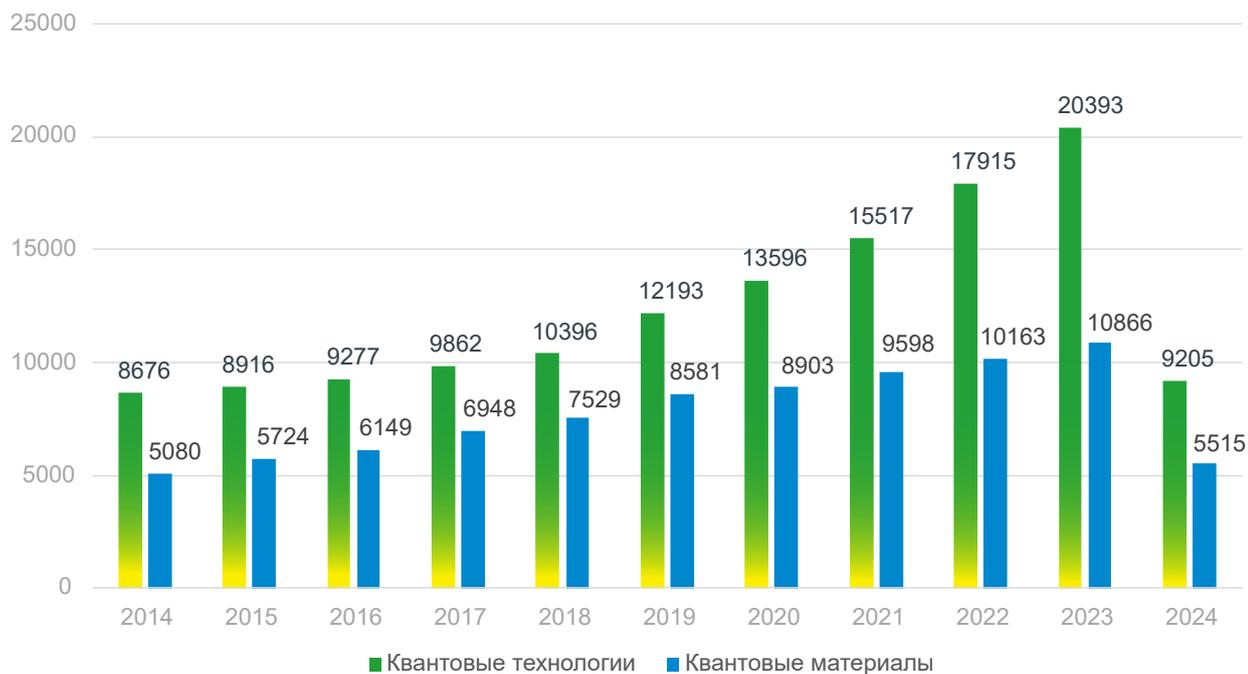
 **Япония**
Специализированные центры по квантовым материалам

 **TOKYO METROPOLITAN UNIVERSITY**
Research Center for Quantum Materials (Tokyo)
2D материалы, нанотрубки, графен, сверхпроводники, топологические материалы

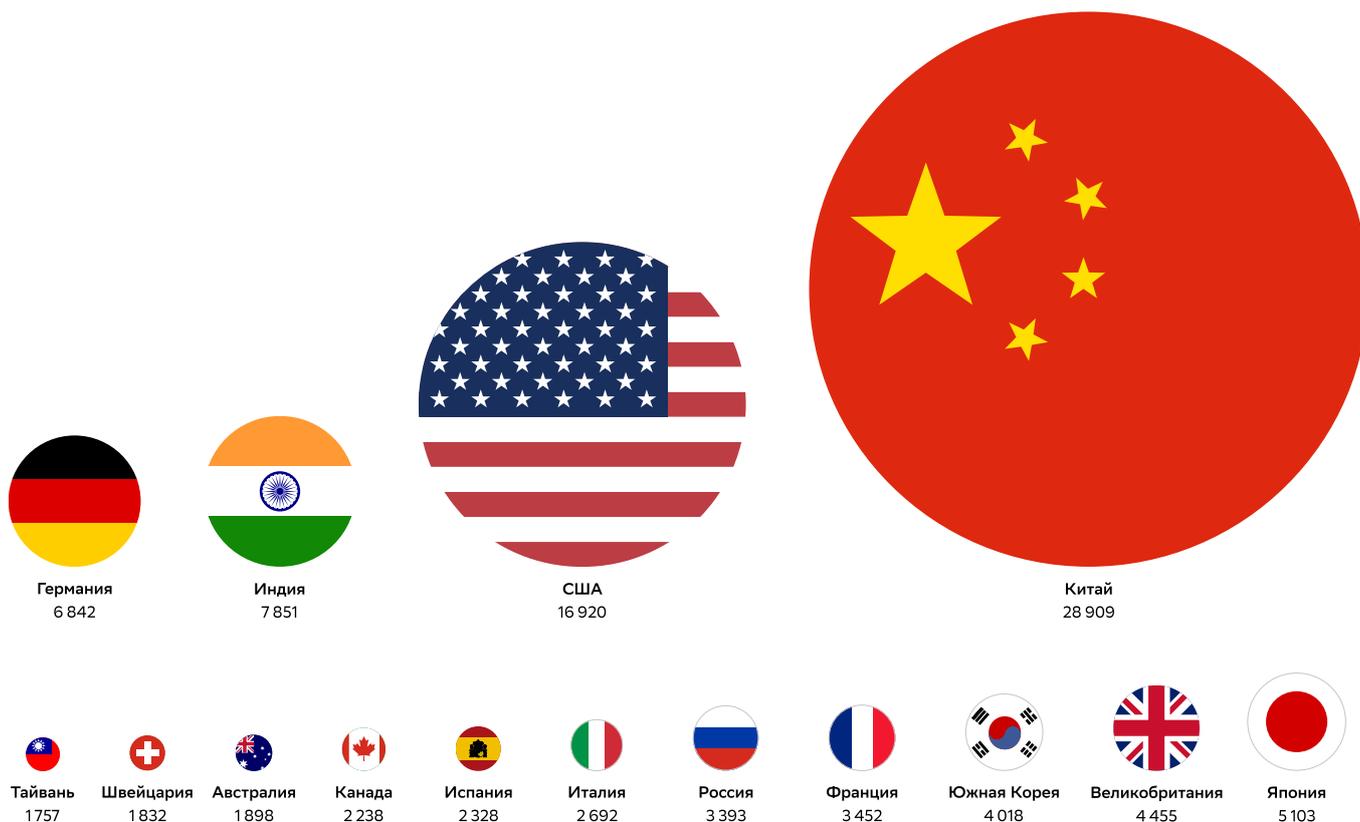
 **QST**
2D материалы, примеси в кремнии и SiC

 **MAX PLANCK INSTITUTE FOR SOLID STATE RESEARCH**
The Max Planck-UCB-UTokyo Center for Quantum Materials
Квантовая жидкость с запутанными спинами и орбиталями

Количество публикаций в мире¹

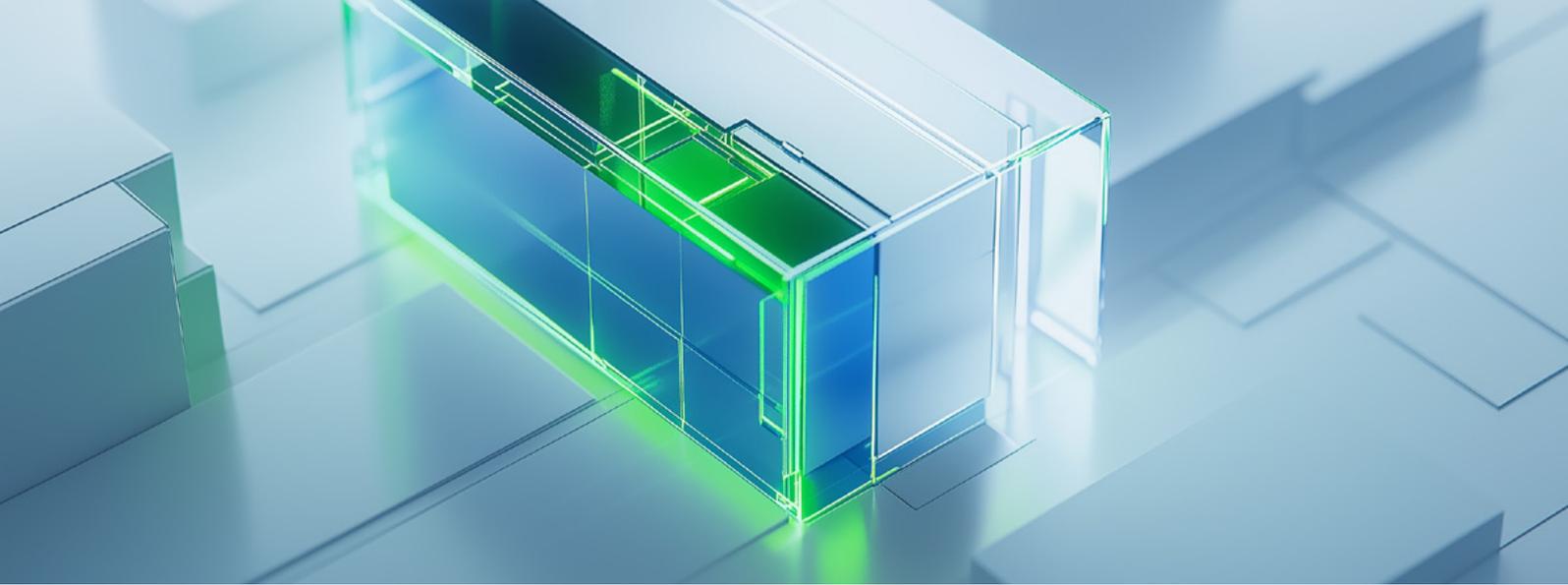


Количество публикаций по странам (за 2014-2024 годы)¹



¹ Результаты поисковых запросов в базе данных рецензируемой научной литературы Scopus по ключевым словам: quantum computer, quantum technology, quantum process, quantum simulator, qubit, quantum memory, quantum repeater, quantum entanglement, quantum state, quantum operation, quantum register, quantum measurement, quantum noise, qudit, quantum annealing, cold atom, rydberg atom, ion trap, trapped ion, paul trap, ising

machine, quantum magnonic, quantum polaritonic, nuclear magnetic resonance, quantum machine learning, quantum error, quantum algorithm, quantum circuit, quantum gate, quantum information, quantum walk, quantum fourier transform, quantum emulator, quantum tomography, quantum optimization, quantum amplitude, quantum compiler, topological quantum, shor algorithm, grover algorithm, vqe, variational quantum, quantum autoencoder



Ключевые выводы отчета

Рынок квантовых вычислений стремительно развивается. Наиболее значимые бизнес-эффекты от применения квантовых вычислений прогнозируются в финансовой отрасли, логистике, искусственном интеллекте и задачах материаловедения.

Наука и технологии

За прошедший год заявлено о создании прототипов квантовых процессоров с тысячами кубитов: квантовый процессор с 1121 кубитом на сверхпроводниках от IBM и 1180-кубитный процессор на нейтральных атомах от Atom Computing. Также создано устройство квантового отжига для решения оптимизационных задач D-Wave с 5000 кубитами на сверхпроводниках. Пока сочетание количества кубитов и качества операций недостаточно для обеспечения преимуществ при решении практических задач. Однако вышеуказанные примеры демонстрируют возможности дальнейшего масштабирования квантовых вычислительных устройств.

Для ускорения процесса перехода на квантовые вычисления продолжаются разработки и пилотирование программных и аппаратно-ускоренных эмуляторов квантовых процессоров, в частности, реализованных компаниями Fujitsu, NVIDIA и Toshiba. Такие системы позволяют в ряде случаев добиваться более эффективного решения задач по сравнению с существующими алгоритмами, а также полезны как переходный этап подготовки к полномасштабному внедрению квантовых вычислений в промышленность.

Количество облачных платформ квантовых вычислений превысило 10, крупнейшей из которых является сервис компании Amazon. Значительно увеличилось количество библиотек промышленных квантовых алгоритмов.

В России в рамках дорожной карты высокотехнологичной области «Квантовые вычисления» развивается 4 основные архитектуры квантовых процессоров: ионная, фотонная, на нейтральных атомах и на сверхпроводниках. ФИАН в 2024 году представил ионный квантовый компьютер на 50 кубит. Запущена первая образовательная платформа квантового программирования «Телеквант»².

Научно-технический потенциал российских ученых в области квантовых вычислений находится на международном уровне, что подтверждено множеством публикаций, патентов и успешными результатами научно-исследовательских проектов и пилотных внедрений.

² «Создан учебный эмулятор 30-кубитного квантового компьютера»
<https://nauka.tass.ru/nauka/20499457>

Рынок, инвестиции и бизнес

В мире продано около 50 квантовых компьютеров и дан старт продаж специализированных образовательных квантовых компьютеров с 2-3 кубитами¹ – в них заинтересованы университеты и исследовательские центры.

По данным публичных аналитических отчетов, в 2035 г. емкость глобального рынка квантовых вычислений, может составить \$50 млрд, а экономический эффект от их внедрения превысит триллион долларов².

В сегменте квантовых вычислений на период 2023-2024 гг. значительная доля выручки компаний была получена от коммерческих исследовательских проектов.

Опыт индустрии и перспективы

В отчете представлены основные квантовые алгоритмы для задач материаловедения, которые подходят для запуска как на эмуляторах, так и на физически-реализованных квантовых компьютерах. Существует более 10 различных алгоритмических подходов к применению квантовых компьютеров для задач материаловедения, что открывает перспективы для разработки новых материалов с помощью квантовых компьютеров.

В отчете рассмотрены кейсы применений квантовых вычислений в моделировании новых материалов в ряде направлений. Квантовые вычисления помогут исследовать конструкционные и композиционные материалы с улучшенными свойствами, углеродные наноматериалы, материалы для аддитивного производства, новые материалы для электроники, новые материалы для агропрома и пищевой промышленности, новые материалы и технологии для энергетики, биомиметические материалы и материалы медицинского назначения.

Новые материалы могут найти применение в широком спектре промежуточных и конечных решений: вычислительная инфраструктура, робототехника, устройства интернета вещей, биомедицина, носимая электроника и многих других.

В наибольшей степени новые материалы и квантовые вычисления для новых материалов полезны компаниям в периметре экосистемы Сбера, а также компаниям-партнерам. Целесообразно рассмотреть создание специализированных сервисов по предоставлению услуг расчета новых материалов с использованием квантовых вычислений и машинного обучения.

Основным вызовом в разработке квантовых алгоритмов для новых материалов является потребность в большом количестве качественных физических кубитов для решения химических задач. Сегодня это частично возможно реализовать с помощью применения методов классического машинного обучения, традиционных вычислительных методов в химии и использования эмуляторов квантовых компьютеров.

Область анализа и разработки новых материалов и, в особенности, квантовых материалов является одной из самых перспективных областей применения квантовых вычислений, так как материалы проявляют свои свойства на атомарном уровне, где преобладают квантовые эффекты.

Глобальный объем рынка новых материалов достиг в 2023 году \$69,28 млрд, а к 2030 году может достигнуть \$99,79 млрд³.

Прогнозируется значительное развитие рынка новых материалов, с одной стороны, развитие методов искусственного интеллекта и квантовых вычислений, с другой. Синергия данных технологий может позволить создать новые рынки.

Не только квантовые вычисления полезны для новых материалов, но и материалы с необычными свойствами могут быть полезны для разработки новых поколений квантовых компьютеров. В данном случае особый интерес представляют квантовые материалы – они могут быть использованы в создании компонентов квантовых компьютеров. Сверхпроводящие кубиты, топологические кубиты, кубиты на квантовых точках, материалы для оптических интегральных схем со сверхнизкими потерями и детекторы квантовых состояний кубитов – все эти направления развития квантовых технологий требуют исследований в области новых материалов.

Сбер продолжит исследовать квантовые и фотонные вычисления для различных применений, в том числе, для задач оптимизации и машинного обучения. Применение новых подходов к вычислениям, которые позволят более эффективно решать сложные промышленные задачи, станет одним из ключевых факторов прогресса во многих направлениях промышленности в ближайшие десятилетия.

¹ SpinQ NMR Quantum Products & Services
<https://www.spinquanta.com/products?category=nmrQuantumProduct>

² <https://thequantuminsider.com/2024/09/13/the-quantum-insider-projects-1-trillion-in-economic-impact-from-quantum-computing-by-2035/>

³ <https://www.precedenceresearch.com/advanced-materials-market>

ISBN 978-5-6048039-4-3



9 785604 803943