

# Computación cuántica: un aporte para la reducción de emisiones de dióxido de carbono en la producción de cemento

Una investigación de **NTT DATA** propone encontrar materiales alternativos utilizando algoritmos cuánticos para reducir considerablemente los niveles de contaminación en la producción de cemento sin perder las propiedades mecánicas y químicas de los compuestos actuales.



# 1. Resumen ejecutivo

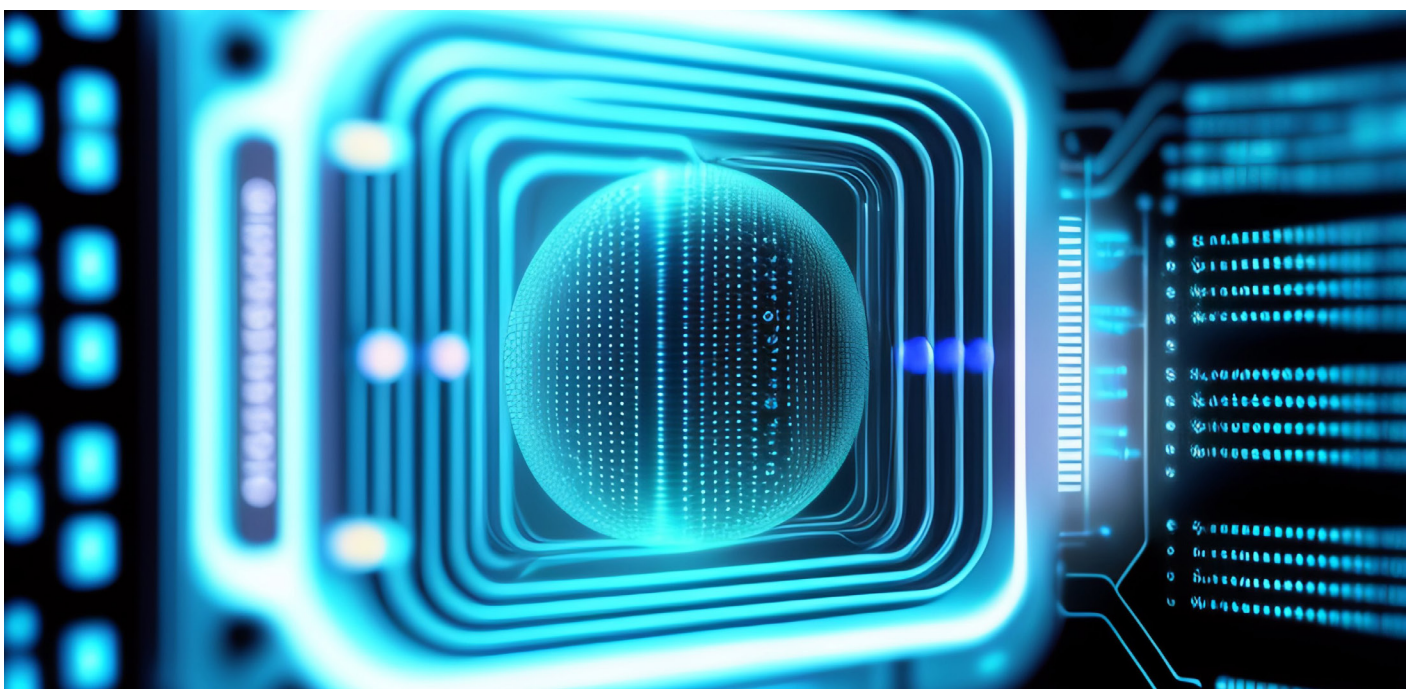
---

Las altas emisiones de dióxido de carbono es uno de los más grandes desafíos que enfrenta la industria del cemento de cara al futuro.

**NTT DATA**, que liderando en la utilización de la computación cuántica para resolver problemas de altísima complejidad computacional, efectuó una investigación con esta revolucionaria tecnología con el objetivo de, a partir de la simulación cuántica de moléculas, encontrar un compuesto alternativo al Clinker, un material fundamental en la producción de cemento pero altamente contaminante, que preserve sus propiedades mecánicas y químicas.

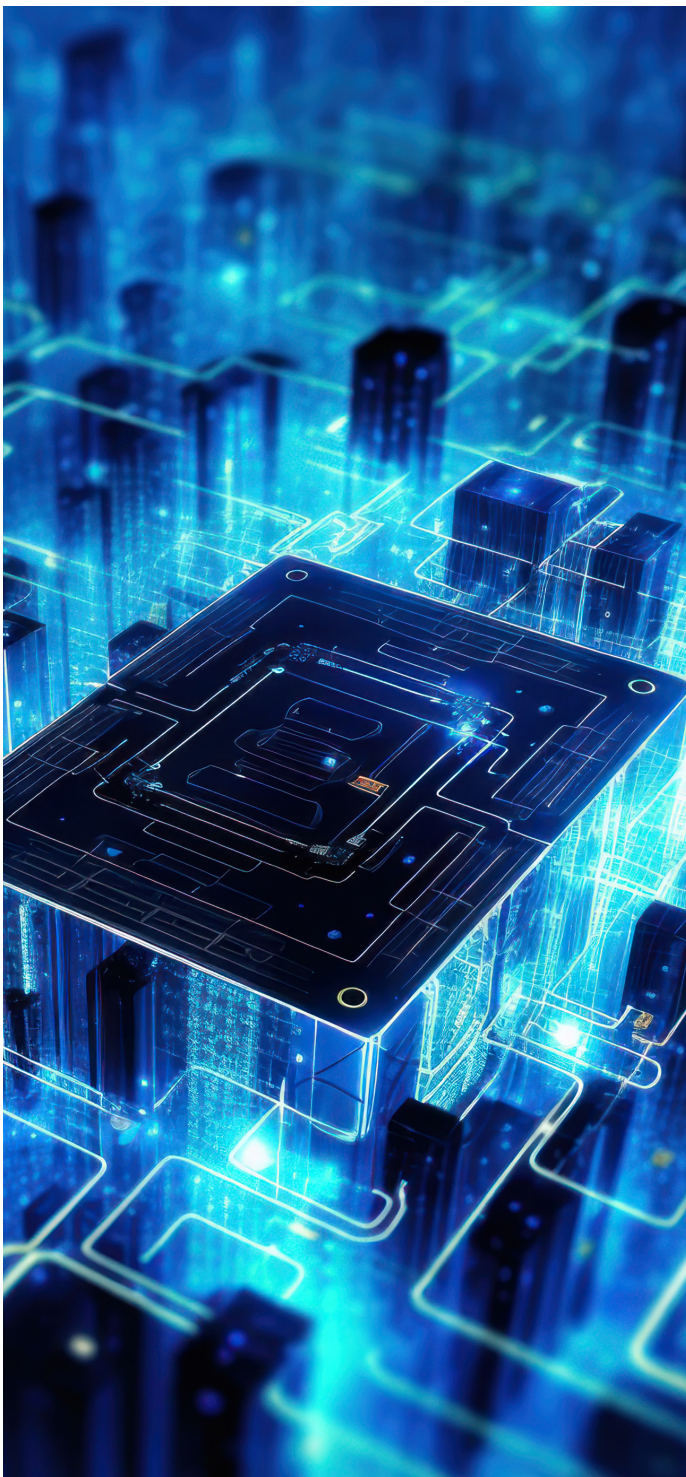
El trabajo está en fase quantum ready: esto significa que el algoritmo está listo para su implementación para cuando estén disponibles las computadoras cuánticas adecuadas.

Este documento técnico explica las tareas realizadas, analiza los pasos a seguir y ofrece una prueba más del potencial que tiene la computación cuántica para impactar en el futuro de todas las industrias.



# 2. Introducción

---



La industria del cemento es una de las principales fuentes de emisiones de dióxido de carbono ( $CO_2$ ), impactando significativamente al cambio climático global, situación ampliamente documentada en [1]. La producción tradicional de cemento implica la calcinación de caliza y arcilla para producir clinker, a través de un proceso que emite grandes cantidades de  $CO_2$ . Ante la creciente urgencia de mitigar las emisiones de gases de efecto invernadero, resulta imperioso explorar alternativas sostenibles. En este contexto, la computación cuántica emerge como una herramienta poderosa para simular y analizar materiales a nivel molecular, lo cual podría generar hallazgos valiosos en el mundo de ciencia de materiales. Este estudio se enfoca en la simulación cuántica de moléculas con el objetivo de descubrir composiciones químicas alternativas para la elaboración de cemento que podrían reducir las emisiones de  $CO_2$  sin comprometer la calidad y la eficacia del material resultante.

Uno de los enfoques prometedores es la exploración de arcillas calcinadas como sustitutos potenciales de algunos componentes tradicionales en la producción de cemento, como se demuestra en [2]. La simulación y el análisis cuántico de diferentes arcillas calcinadas permiten la determinación de sus estados fundamentales, proporcionando una comprensión de sus propiedades y comportamientos a nivel molecular. A través de estos análisis, es posible identificar candidatos prometedores que podrían



servir como materiales alternativos en la producción de cemento, contribuyendo así a la reducción de la necesidad de calcinación y, en consecuencia, de las emisiones de  $\text{CO}_2$ .

En particular, este proyecto busca consolidar las bases para una futura investigación del estado fundamental de la alita (C3S), un componente crucial en la producción de clinker, mediante la simulación de sus componentes  $\text{C}_a\text{OySiO}_2$ . Hallar y comprender el estado fundamental de la alita es crucial. Este conocimiento, combinado con el análisis de arcillas calcinadas, podría revelar nuevas composiciones para el cemento, estableciendo así métodos de producción más sostenibles y ecoamigables.

La computación cuántica promete simular la mecánica cuántica exponencialmente más rápido que lo que podría una computadora convencional. Los qubits,

“

Los qubits, elementos centrales en la computación cuántica, exhiben un comportamiento que muestra una similitud con los fermiones. Estas partículas elementales, como los electrones, siguen el principio de exclusión de Pauli y son fundamentales en la determinación de las propiedades químicas y físicas moleculares.

elementos centrales en la computación cuántica, exhiben un comportamiento que muestra una similitud con los fermiones. Estas partículas elementales, como los electrones, siguen el principio de exclusión de Pauli y son fundamentales en la determinación de las propiedades químicas y físicas moleculares. Esta similitud es crucial, ya que permite que los qubits

modelen de manera efectiva el comportamiento de los electrones en las moléculas, haciendo de la computación cuántica una herramienta ideal para explorar complejidades que no son realizables en ordenadores clásicos [3].

La química cuántica es una prometedora aplicación de la computación cuántica. La implementación de algoritmos cuánticos, como el Variational Quantum Eigensolver (VQE), permite una simulación más precisa y detallada de las interacciones moleculares y los estados energéticos [4]. Esta precisión es fundamental para obtener el estado fundamental y comprender algunos fenómenos como el enlace químico, las reacciones químicas, y las propiedades de materiales a nivel molecular.

La computación cuántica ofrece obtener un entendimiento mucho más profundo para la evaluación y selección de materiales alternativos, ampliando significativamente las fronteras de la investigación y el desarrollo en diversas áreas científicas y tecnológicas [5].

El método empleado (VQE) es un procedimiento que no solo es esencial para entender la configuración energética más estable de una molécula, sino que también proporciona información detallada sobre las propiedades inherentes y la reactividad potencial de los materiales en consideración. Por tanto, el VQE se presenta como un componente potencial en el avance de la química computacional y en la ingeniería de materiales.



# 3.

## Simulación de moléculas: Conceptos Cuánticos

---

La representación de fermiones en la computación cuántica, el funcionamiento del algoritmo VQE y la descripción del Hamiltoniano Molecular, son conceptos esenciales para la simulación de moléculas. Además, el congelamiento de orbitales y el método de Hartree-Fock son cruciales para acelerar la búsqueda del estado de menor energía, economizando tiempo y recursos computacionales.

### 3.2 Representación de fermiones en la computación cuántica

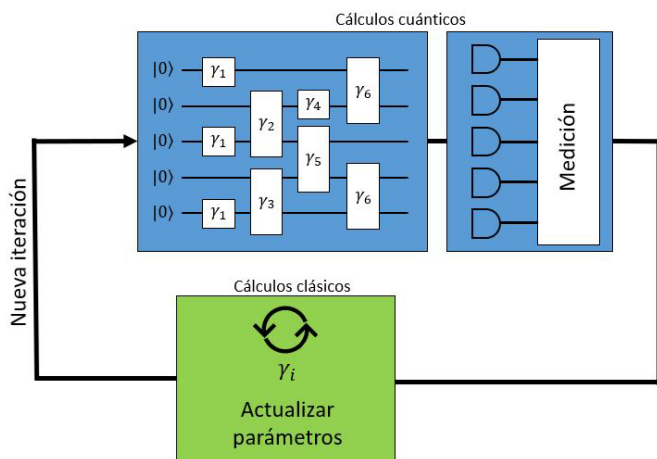
La naturaleza de los fermiones requiere una representación precisa en el espacio de Hilbert, un proceso que se logra mapeando los fermiones a qubits. Un método fundamental en este proceso es el mapeo por paridad, el cual es ampliamente utilizado en investigaciones actuales [6].

Este mapeo asigna fermiones a qubits de manera que las operaciones de creación y aniquilación de fermiones se traducen en operaciones sobre qubits, facilitando así la simulación del comportamiento cuántico de las moléculas en procesadores cuánticos. El mapeo por paridad se destaca por su eficiencia en la representación de los estados cuánticos, manteniendo una localidad favorable en comparación con otros métodos. Esto lo hace particularmente útil en simulaciones cuánticas complejas, especialmente en el campo de la química cuántica y la física de materiales. Cabe mencionar que existen otros métodos, como la transformación de Jordan-Wigner o Bravyi-Kitaev, que también se utilizan para propósitos similares [7].

### 3.2 Algoritmo cuántico-clásico VQE

El Algoritmo Variational Quantum Eigensolver (VQE) es un método heurístico para hallar el estado fundamental de un Hamiltoniano, empleando un enfoque híbrido cuántico-clásico. El VQE opera inicialmente seleccionando una función de onda parametrizada,

la cual es una aproximación del estado cuántico de la molécula, y es utilizando conjuntamente con el operador Hamiltoniano que describe el estado energético de la molécula. Como se puede observar en la Figura 1, el VQE emplea ciclos iterativos, donde una computadora cuántica prepara el estado cuántico y realiza mediciones para estimar la energía del sistema. Esta estimación es luego procesada por un algoritmo clásico de optimización, el cual ajusta unos parámetros que modifica la función de onda. Luego, se vuelve a medir el estado, y se repite el ciclo reiteradamente hasta encontrar un estado de menor energía, como se analiza en [8].



### 3.3 Hamiltoniano molecular

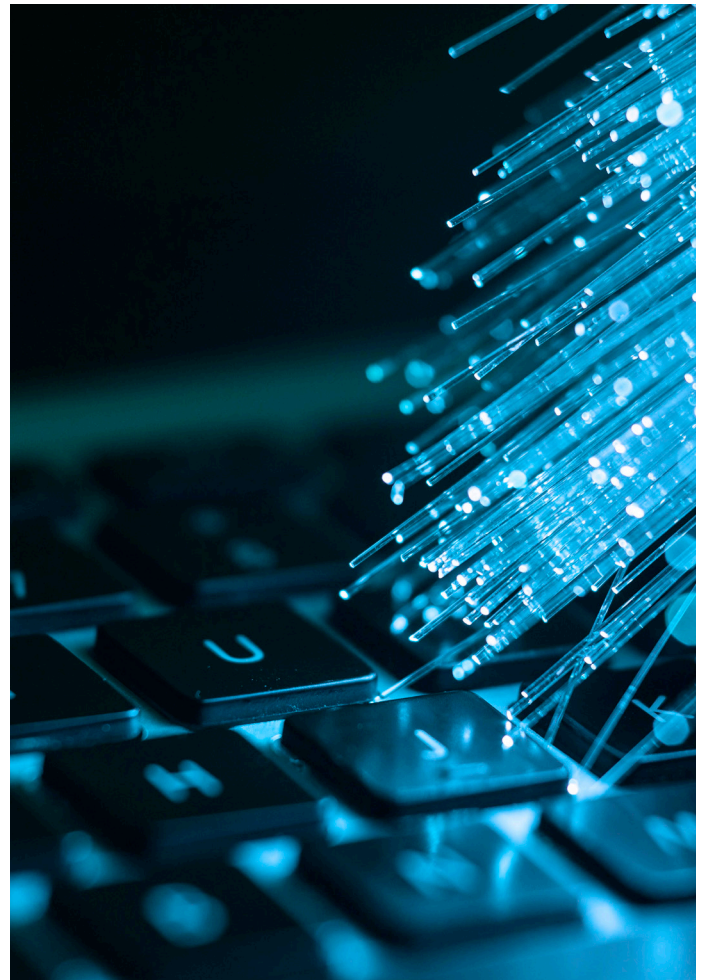
El Hamiltoniano en mecánica cuántica es un operador clave que detalla la energía total de un sistema. Para este estudio se adopta la aproximación de Born-Oppenheimer para el Hamiltoniano molecular, el cual considera las energías e interacciones de los electrones mientras que trata los núcleos como si estuvieran estáticos.

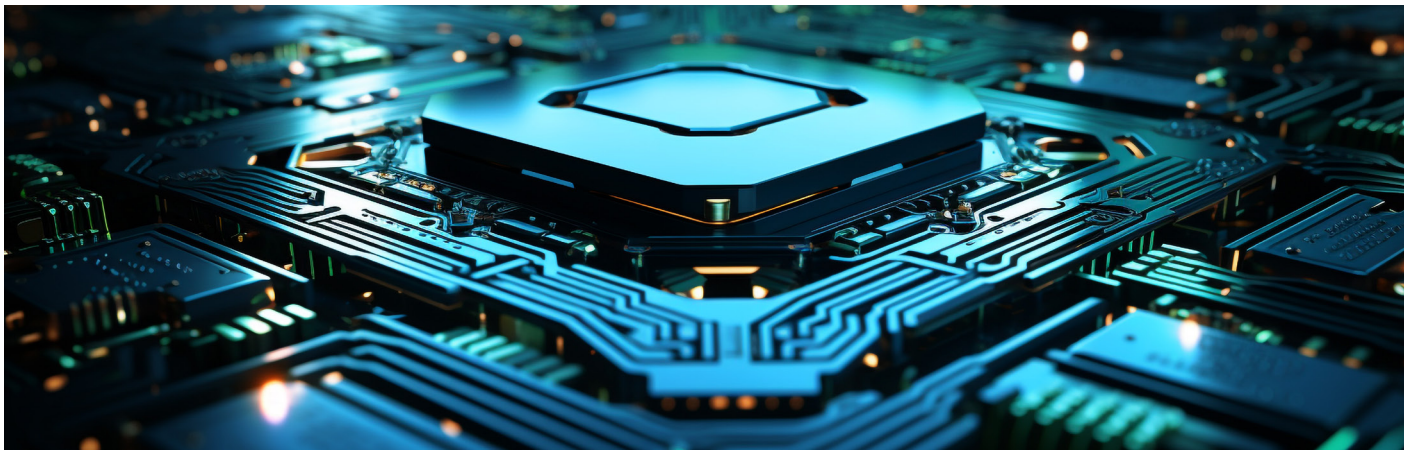
Este enfoque se justifica por la gran diferencia de masa y velocidad entre electrones y núcleos, lo que permite simplificar los cálculos cuánticos y enfocarse en las propiedades de los electrones de

la molécula. En la ecuación (1) se muestra solo la energía cinética de los electrones, la interacción Coulumbiana Electrón-Núcleo y la interacción Coulumbiana Electrón-Electrón. Como se mencionó anteriormente, debido a la diferencia de velocidades, la interacción Coulumbiana Núcleo-Núcleo y la energía cinética nuclear se convierten en un cambio de energía.

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{A=1}^N \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i>j} r_{ij} \quad (1)$$

La ecuación (1) presenta diferentes variables, donde  $\hat{H}$  representa el Hamiltoniano,  $N$  es la cantidad de electrones,  $Z_A$  es la carga del núcleo  $A$ ,  $r_{iA}$  es la distancia entre el electrón  $i$  y el núcleo  $A$ , y  $r_{ij}$  es la distancia entre el electrón  $i$  y el electrón  $j$ .





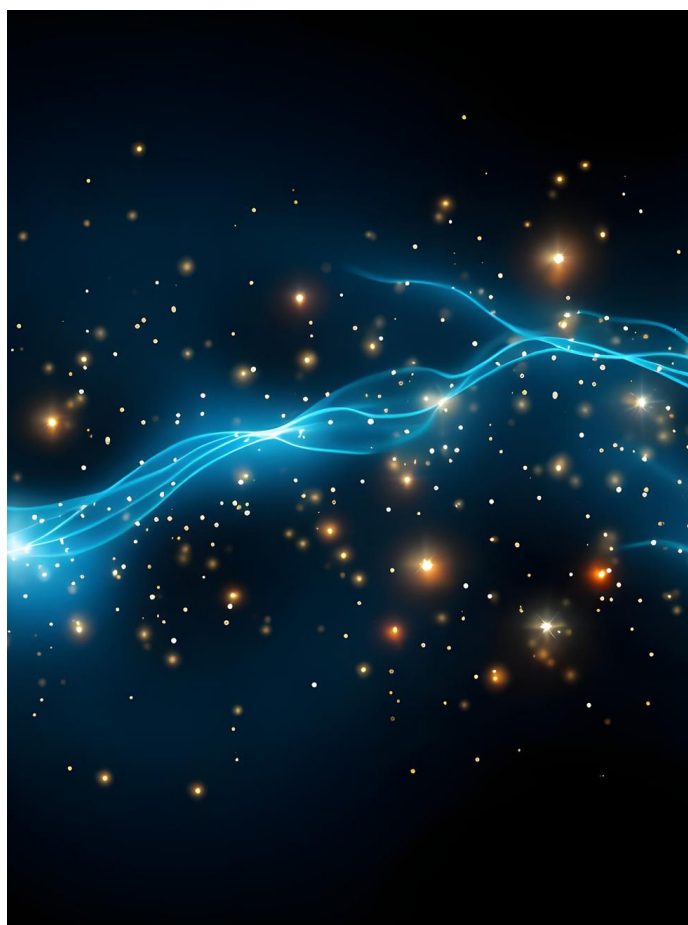
### 3.4 Congelamiento de orbitales

Para optimizar la ejecución del algoritmo VQE, se pueden aplicar técnicas como la congelación de orbitales. Esta estrategia consiste en identificar y excluir aquellos orbitales que no contribuyen significativamente al estado fundamental de la molécula, reduciendo así la complejidad del problema y la cantidad de recursos cuánticos necesarios, como se puede analizar en [9]. Esta optimización es crucial dadas las limitaciones actuales de las computadoras cuánticas, las cuales todavía presentan desafíos en términos de ruido y coherencia de los qubits.

### 3.5 Método de Hartree-Fock en simulaciones moleculares

El método de Hartree-Fock es crucial en simulaciones moleculares, ofreciendo una estimación inicial para el estado fundamental de las moléculas. Basado en orbitales que predicen dónde es probable encontrar electrones, este método simplifica el complejo problema cuántico de múltiples cuerpos. En lugar de tratar cada interacción electrón-electrón, cada electrón se considera en un campo electrostático promedio creado por los demás. Esta simplificación reduce la complejidad computacional y sirve como un

punto de partida eficiente para tener un análisis más detallados, como se muestra en [10]. En el contexto del VQE, Hartree-Fock es vital para inicializar la función de onda parametrizada, que luego se optimiza iterativamente. Esto acelera la búsqueda del estado fundamental, economizando tiempo y recursos computacionales.



# 4.

## Metodología: Quantum Ready

El desafío en la selección de arcillas calcinadas idóneas para la fabricación de cemento con menores emisiones de CO<sub>2</sub> radica en la necesidad de examinar una amplia gama de estas arcillas, que presentan propiedades finales distintas dependiendo de su tipo y las condiciones bajo las que se calcinan. Para abordar esta variabilidad de manera eficaz, se propone la implementación de algoritmos cuánticos.

Estos algoritmos son cruciales para determinar el estado fundamental de diferentes tipos de arcilla calcinada, lo que simplifica la identificación de las más aptas para conservar las propiedades requeridas en el cemento, a la vez que reducen la emisión de CO<sub>2</sub>. Por lo tanto, se ha programado llevar a cabo el proceso descrito en la Figura 2. Este método es clave para optimizar la compleja tarea de seleccionar las arcillas adecuadas, ya que mediante la simulación molecular se puede determinar el estado fundamental de cada variedad de arcilla.

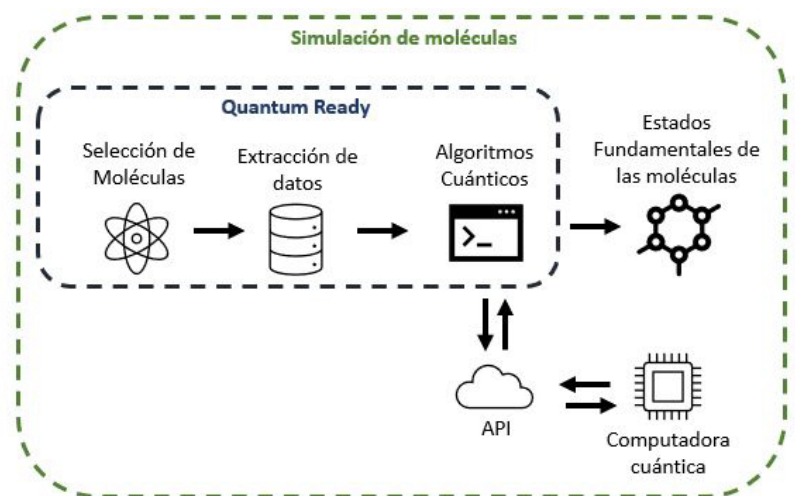


Figura 2: Metodología general para la simulación de moléculas

Esta investigación se enfoca en la fase denominada "Quantum Ready", que implica el desarrollo y preparación de algoritmos cuánticos para su futura implementación. Inicialmente, se seleccionaron específicamente moléculas de arcillas calcinadas y la alita para analizar sus estados fundamentales. La metodología empleada en esta investigación implica la utilización de un conjunto uniforme de algoritmos para la simulación de las diferentes moléculas. Esto asegura que el procedimiento para determinar el estado fundamental es consistente a través de todas las moléculas estudiadas. Sin embargo, para mayor claridad y concisión, se detalla exclusivamente los procedimientos aplicados a la molécula CaO que juega un papel crucial en la formación de la alita. Cabe destacar que, aunque se utiliza esta molécula como caso de estudio, los pasos descritos son directamente aplicables a las demás moléculas. Es importante destacar que la tecnología empleada para estos algoritmos cuánticos proviene de los desarrollos realizados por la empresa IBM.

Para la simular el óxido de calcio (CaO) se deben conocer ciertas propiedades, como sus símbolos químicos, las coordenadas de sus núcleos, multiplicidad y carga. La molécula CaO indica que presenta una molécula de calcio y otra de oxígeno. Para su simulación se utilizaron los símbolos químicos O y Ca, los cuales representan a los elementos químicos oxígeno, calcio respectivamente.

Para las coordenadas de sus núcleos, se asumió que el punto de referencia será el origen y que las longitudes de enlace están entre 2,25 y 2,75 angstrom (Å). La multiplicidad del CaO tiene un valor de 1 y presenta una carga neutra de 0. Una vez obtenido la información de la molécula, se procede a realizar la creación y la configuración inicial del modelo molecular en un entorno de computación cuántica o química computacional. Posteriormente, se decide aplicar la técnica de congelamiento de orbitales. Esta técnica permite reducir la cantidad de estados cuánticos, ya que se



va a reducir la cantidad de orbitales a analizar. Una vez aplicada la técnica de congelamiento, se halla la cantidad de electrones y orbitales que tiene el modelo para realizar el mapeo de los fermiones a qubits utilizando la técnica de Paridad. Una vez realizado este procedimiento se procede a obtener la representación de energía del sistema, es decir el Hamiltoniano. Luego se configura el algoritmo VQE. En este estudio, se seleccionaron dos optimizadores esenciales : *SPSA* (Simultaneous Perturbation Stochastic Approximation), utilizado en simuladores cuánticos para modelar moléculas pequeñas, y *SLSQP* (Sequential Least Squares Programming), empleado en computadoras cuánticas reales para la simulación molecular.

Ambos optimizadores juegan un papel crucial en el ajuste de parámetros del algoritmo VQE, orientado a la obtención de la energía mínima del Hamiltoniano. El optimizador *SPSA* se utilizó con el fin de realizar una simulación de moléculas usando un simulador cuántico para corroborar que se realizó con éxito los pasos anteriores, de

la presente metodología, y para observar un adelanto de los estados fundamentales que se pueden obtener al variar las longitudes de enlace del compuesto  $\text{CaO}$ . Es importante destacar que este proceso se llevó a cabo con una computadora clásica de alta capacidad, optando por simular específicamente el óxido de calcio debido a su menor número de electrones. Esto se debe a que un mayor conteo de electrones incrementa la cantidad de orbitales, elevando significativamente la complejidad computacional. De hecho, simular compuestos con un elevado número de electrones podría requerir días debido a su gran complejidad.

Por otro lado, si se quisiera realizar la simulación molecular de la alita se tendría que simular el compuesto  $3\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ , lo cual no es posible para una computadora clásica. Sin embargo, al cambiar el optimizador *SPSA* al optimizador *SLSQP*, en la configuración del algoritmo VQE, se tendría todo listo para la futura simulación molecular completa en una computadora cuántica, es decir se llegaría a completar el "Quantum Ready".

# 5. Resultados

Para obtener el estado fundamental del compuesto CaO se necesita variar la posición de sus núcleos, es decir se debe hallar el estado fundamental en diferentes longitudes de enlace hasta encontrar el menor valor posible. Para el compuesto CaO, se estableció el núcleo de la molécula de calcio en el origen, es decir, en la posición [0, 0, 0]. Luego, se modificó únicamente la posición del núcleo del oxígeno a lo largo del eje X, mientras que las posiciones en los ejes Y y Z se mantuvieron fijas en el origen. El valor en el eje X se ajustó en un rango de 2,25 a 5 Angstroms (°A), incrementándose en intervalos de 0,25 °A. Es relevante mencionar que también se empleó un algoritmo clásico para comparar los resultados obtenidos mediante algoritmos cuánticos y clásicos, permitiendo así una evaluación integral y comparativa de ambos enfoques.

La Figura 3 ilustra los resultados de la simulación del compuesto CaO, realizada a través de algoritmos tanto clásicos como cuánticos, con un enfoque particular en la variación de la longitud de enlace. Se observa que el estado fundamental del óxido de calcio, determinado mediante el algoritmo cuántico, tiene una energía de  $-743,7418$  Hartrees (Ha). En paralelo, al emplear el algoritmo clásico para la misma simulación, el estado fundamental del compuesto se identifica con una energía de  $-743,82283$  Hartrees (Ha), proporcionando una comparativa valiosa entre ambos enfoques. Los resultados indican

una mínima diferencia de 0,01 % entre los algoritmos cuánticos y clásicos, evidenciando una equivalencia en sus resultados. Sin embargo, la principal diferencia radica en el tiempo de ejecución de los algoritmos para obtener los estados fundamentales. Las computadoras clásicas se limitan a la simulación de compuestos simples, mientras que las computadoras cuánticas permitirán una simulación más rápida, incluso de compuestos complejos como la alita. Esta gran ventaja permitirá acelerar el proceso de investigación para desarrollar una composición química alternativa del cemento que reduzca significativamente las grandes emisiones de  $CO_2$ , preservando las propiedades fundamentales del cemento. Esta ventaja computacional frente a las computadoras clásicas se ha demostrado en diferentes investigaciones como en [11] [12].

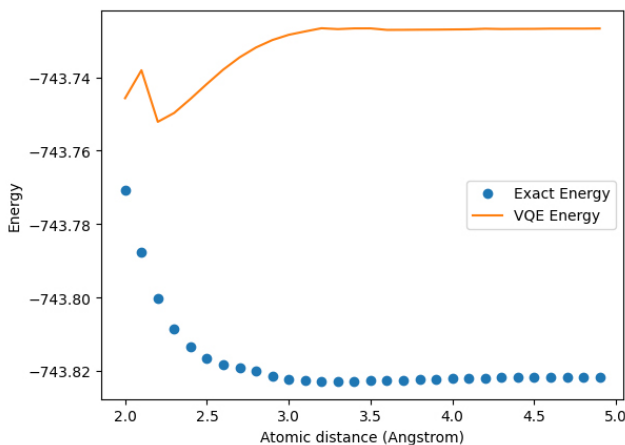


Figura 3: Simulación del óxido de calcio mediante algoritmos cuánticos y clásicos.

# 6.

## Pasos a seguir y recomendaciones

---

Este estudio se enfocó exclusivamente en la fase de "Quantum Ready". No obstante, una vez terminada la etapa de implementación en computadoras cuánticas, se contempla llevar a cabo un análisis detallado de los estados fundamentales de diversas arcillas calcinadas y de la alita. El objetivo es explorar nuevas composiciones para el cemento, buscando específicamente disminuir la emisión de CO<sub>2</sub> durante su producción, sin comprometer sus propiedades esenciales. Una vez obtenido los estados fundamentales se puede realizar los siguientes análisis:

- **Energías de reacción:** La energía de reacción se refiere a la diferencia entre las energías de los reactivos y los productos. Esta diferencia puede indicar el tipo de reacción:
  - **Exotérmica:** Si la energía del estado fundamental de los productos es inferior a la suma de las energías de los reactivos, la reacción liberará la diferencia en energía, típicamente en forma de calor.
  - **Endotérmica:** Por el contrario, si la energía de los productos es superior, la reacción absorberá energía.
- **Carreras de activación:** No todas las reacciones comienzan de inmediato. Algunas requieren un impulso energético inicial, denominado energía de activación. Mediante cálculos teóricos, es viable estimar estas barreras energéticas, lo que permite prever la velocidad a la que una reacción puede desarrollarse.
- **Estabilidad termodinámica:** La estabilidad de un compuesto se puede inferir de su energía en estado fundamental. Un valor de energía más bajo generalmente señala un

compuesto más estable. Esta estabilidad es fundamental, especialmente cuando se evalúa la idoneidad de un material bajo condiciones específicas, como altas temperaturas o en presencia de otros agentes químicos.

- **Propiedades reactivas:** La energía del estado fundamental también arroja luz sobre la reactividad de un compuesto. Un compuesto con una energía de estado fundamental elevada (menos negativa) tiende a ser más reactivo. Esto se debe a que posee más energía disponible para involucrarse en una reacción.
- **Diseño molecular y aplicaciones:** Entender las variaciones en la energía del estado fundamental con alteraciones en la estructura molecular es crucial. Si se busca, por ejemplo, diseñar un material resistente a la degradación química (como oxidación o reducción), se optaría por materiales con energías de estado fundamental estables (valores de energía bajos). Esta información también es vital al diseñar catalizadores, que ayudan a facilitar reacciones específicas sin agotarse en el proceso.

El uso de computadoras cuánticas en la simulación de moléculas emerge como un campo prometedor en la química cuántica, potenciando significativamente la eficacia de las investigaciones de laboratorio. Tradicionalmente, estos estudios requieren largos períodos y un considerable despliegue de recursos,

con un alto índice de error en los métodos de prueba y ensayo. La incorporación de esta nueva metodología en estudio permitirá una notable reducción de estos errores, optimizando el uso de recursos y enfocando las pruebas de laboratorio hacia aquellas hipótesis que han demostrado éxito y viabilidad a través de la computación cuántica.

Una recomendación importante es considerar que el valor del estado fundamental de las moléculas simuladas puede variar al ajustar la posición de sus núcleos en los ejes X, Y y Z. Es crucial realizar estos ajustes hasta lograr la convergencia del estado fundamental. Además, se sugiere modificar el número de iteraciones en el optimizador clásico del algoritmo VQE, optando por un valor que no sea excesivamente alto para optimizar el uso de recursos computacionales. Asimismo, es recomendable profundizar en la investigación sobre la mitigación del ruido en computadoras cuánticas. Dicho ruido puede originarse por múltiples factores, como la incapacidad de alcanzar la temperatura ideal de cero absoluto dentro de la computadora cuántica o la interacción entre qubits adyacentes. Por último, se alienta a realizar más investigaciones en el campo de los materiales utilizando computadoras cuánticas. Dado que los fermiones exhiben propiedades mecánico-cuánticas similares a las de los qubits, el uso de computadoras cuánticas en proyectos de química cuántica representa actualmente un campo de gran promesa, como se detalla en [13] [14].

# 7. Conclusiones

---

Aún siendo un campo en desarrollo, los casos de uso concretos y potenciales que aprovechan la computación cuántica para revolucionar industrias e impactar positivamente en el futuro comienzan a multiplicarse.

Puntualmente, como queda demostrado en este documento técnico, existe una enorme oportunidad en el área de la química cuántica y el desarrollo de materiales, en el cual se realiza la simulación de moléculas para encontrar alternativas sustentables y ecoamigables que reemplacen ciertos elementos contaminantes que predominan hoy en determinados procesos productivos.

A medida que nos aproximamos a la era de las computadoras cuánticas tolerantes a fallos, el avance hacia la etapa "Quantum Ready" nos posiciona un paso adelante en la investigación de nuevos materiales. Esta crucial etapa preparatoria asegura que dispongamos de los algoritmos necesarios para ejecutar simulaciones moleculares en computadoras cuánticas, facilitando así un progreso más rápido y eficiente en nuestras investigaciones.



## Referencias

---

- [1] A. G. Perera and M. d. P. S. Dionisio, "Alternativas de reducción de las emisiones de dióxido de carbono (co) en la producción de cemento. propuesta de un modelo de evaluación," *Innovar: Revista de ciencias administrativas y sociales*, pp. 51–66, 2016.
- [2] Y. Ruíz Rosa, E. R. Rosa Domínguez, S. Sánchez Berriel, L. Castillo Hernández, J. F. Martirena Hernández, and N. Suppen Reynaga, "Análisis de ecoeficiencia de la producción de cementos de bajo carbono mediante la sustitución de clinker," *Centro Azúcar*, vol. 44, no. 2, pp. 77–88, 2017.
- [3] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information*. Cambridge university press, 2010.
- [4] L. Veis, J. Višňák, H. Nishizawa, H. Nakai, and J. Pittner, "Quantum chemistry beyond born–oppenheimer approximation on a quantum computer: A simulated phase estimation study," *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 116, no. 18, pp. 1328–1336, 2016.
- [5] R. M. Parrish, E. G. Hohenstein, P. L. McMahon, and T. J. Martínez, "Quantum computation of electronic transitions using a variational quantum eigensolver," *Physical review letters*, vol. 122, no. 23, p. 230401, 2019.
- [6] M. Fellner, A. Messinger, K. Ender, and W. Lechner, "Universal parity quantum computing," *Physical Review Letters*, vol. 129, no. 18, p. 180503, 2022.
- [7] A. Tranter, P. J. Love, F. Mintert, and P. V. Coveney, "A comparison of the bravyi–kitaev and jordan–wigner transformations for the quantum simulation of quantum chemistry," *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 14, no. 12, pp. 5617–5630, 2018.
- [8] J. Tilly, H. Chen, S. Cao, D. Picozzi, K. Setia, Y. Li, and E. Grant, "The variational quantum eigensolver: A review of methods and best practices," *Physics Reports*, vol. 986, pp. 1–128, 2022.

- [9] Anon, "Orbital-optimized pair-correlated electron simulations on trapped-ion quantum computers," *npj Quantum Information*, 2021.
- [10] V. Bach, "Hartree-fock theory, lieb's variational principle, and their generalizations," 2022.
- [11] R. Babbush, D. W. Berry, R. Kothari, R. D. Somma, and N. Wiebe, "Exponential quantum speedup in simulating coupled classical oscillators," *Phys. Rev. X*, vol. 13, no. 041041, 2023.
- [12] A. M. Childs, D. Maslov, Y. Nam, N. J. Ross, and Y. Su, "Toward the first quantum simulation with quantum speedup," *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, vol. 115, no. 9456-9461, 2018.
- [13] M. Motta and J. E. Rice, "Emerging quantum computing algorithms for quantum chemistry," *WIREs Computational Molecular Science*, vol. 12, Dec. 2021.
- [14] S. McArdle, S. Endo, A. Aspuru-Guzik, S. C. Benjamin, and X. Yuan, "Quantum computational chemistry," *Reviews of Modern Physics*, vol. 92, Mar. 2020.



[pe.nttdata.com](https://pe.nttdata.com)

