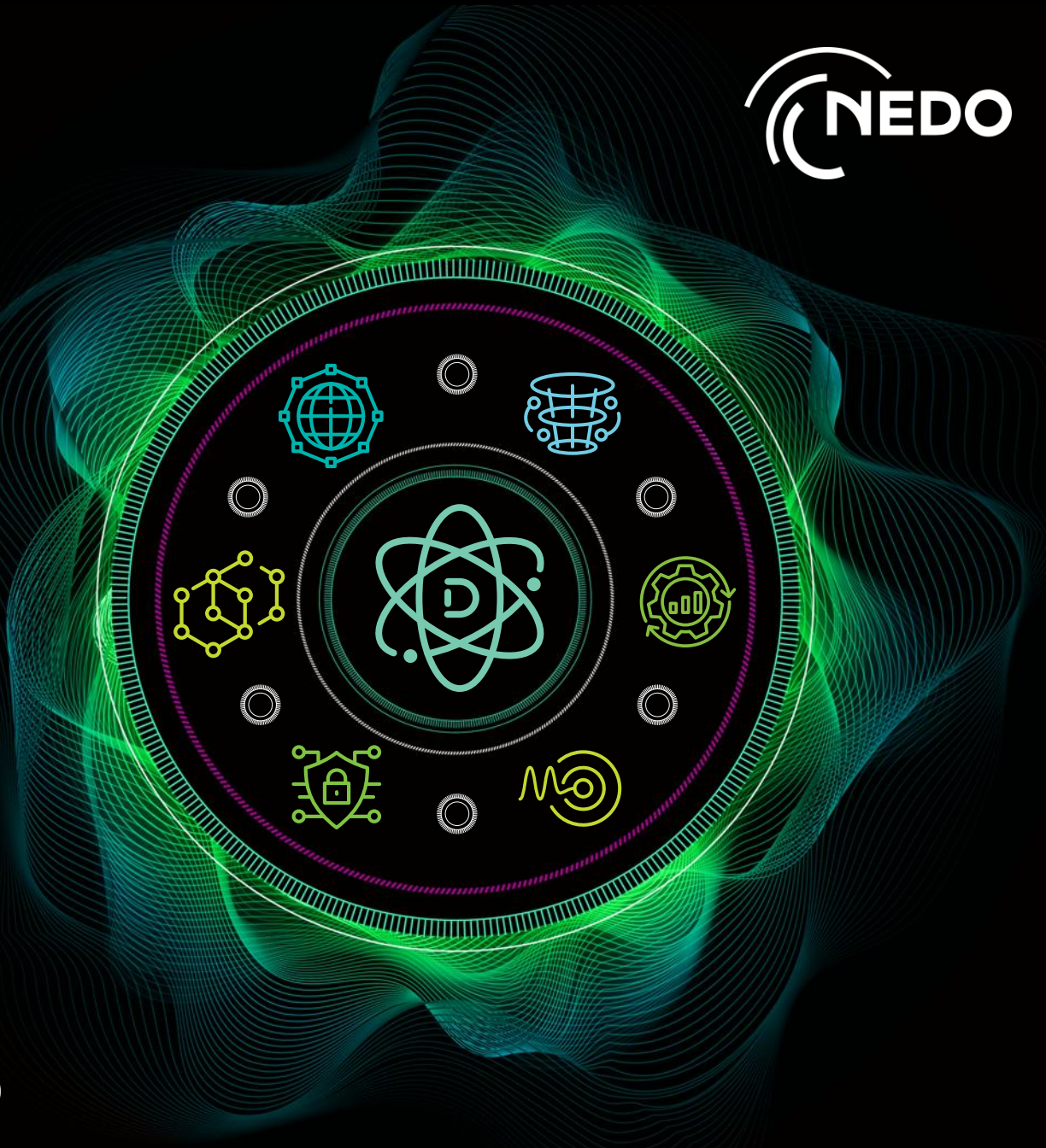
量子コンピューティング ユースケース集

材料の物性値予測や
様々な化学反応の解析シミュレーション



TOPPAN·大阪大学

国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）

TOPPAN・大阪大学：材料の物性値予測や様々な化学反応の解析シミュレーション　【2023/04】　1 ／ 2

構想

産業領域　製造・プロセス
プロセス　研究開発
手法　シミュレーション
技術分類　ゲート*

取組の背景

- 量子コンピューターは様々な産業に大きな変革をもたらす革新的な技術であると期待されている
  - ✓ 特に、**化学の分野では、革新的な新規材料の創出などが期待**されている
- これまでの材料開発は、研究者が過去のデータや経験を基に、所望の物性値を持つと期待できる分子構造を設計し、実際に合成、物性値の測定などを繰り返し行うことで、有望な化合物を探索するため、**多くの時間が必要**である
- 近年、**マテリアルズインフォマティクス（MI）などの新しい手法を活用することで、研究開発の加速**が図られるようになってきた
  - ✓ 機能発現のメカニズムなどを解明する計算化学
  - ✓ AIなどによる膨大な材料データを効率的なスクリーニング

解決したい課題・モチベーション

- 計算化学に量子コンピューターを利用することで、古典コンピューターでは計算できないような複雑な分子に関しても、**高速・高精度に計算できる可能性があると期待**が高まってきている
- 量子コンピューターで計算した分子の構造や特性値は、MIにとっても重要な学習データとなり、スクリーニングの際の探索領域が格段に広がることが期待される
- 凸版印刷と大阪大学量子情報・量子生命研究センター（QIQB）は、**量子化学計算アルゴリズムの開発と実証を行う共同研究を開始**した

期待されるビジネス効果

- 本共同研究を通じ、**材料の開発・評価プロセスの変革とスピードアップ、革新的な新規材料や機能性材料の創出**などを目指す

参考：TOPPANホールディングス株式会社「凸版印刷と大阪大学量子情報・量子生命研究センター、量子コンピューターを活用した材料開発・評価手法に関する共同研究を開始」（https://www.holdings.toppan.com/ja/news/2023/04/newsrelease230411_1.html）
*ゲート（gate-based）= 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

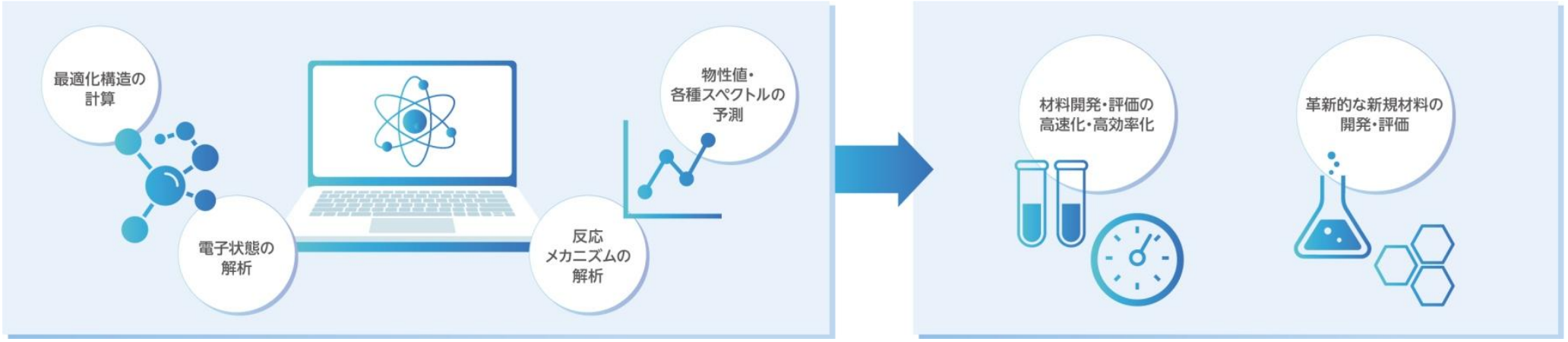
TOPPAN・大阪大学：材料の物性値予測や様々な化学反応の解析シミュレーション 【2023/04】 2／2

構想

産業領域	製造・プロセス
プロセス	研究開発
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

量子コンピューターとしての問題設定

- **新規材料の物性値計算や化学反応の解析シミュレーションを量子コンピューターで実行するための量子化学計算アルゴリズム**を開発する
  - ✓ 凸版印刷の事業領域で開発・製造する半導体・ディスプレイ関連部材や建装材・パッケージなどの材料の物性値予測
  - ✓ 様々な化学反応の解析シミュレーションなどの演算
- これらにより、**古典コンピューターでは計算できなかった分子の計算が可能かを検証**する
- 量子化学計算を行うため、**ゲート方式**を用いる



量子コンピューター活用イメージ

参考：TOPPANホールディングス株式会社「凸版印刷と大阪大学量子情報・量子生命研究センター、量子コンピューターを活用した材料開発・評価手法に関する共同研究を開始」（https://www.holdings.toppan.com/ja/news/2023/04/newsrelease230411_1.html）

*ゲート（gate-based）＝ 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

WEBサイトにて、その他の事例も公開しています。ぜひご覧ください。
https://www.quantum-computing-use-cases.nedo.go.jp

他の事例を見る

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）
AI・ロボット部（e-mail：quantum_ai@ml.nedo.go.jp）

本ユースケース集は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術開発機構（NEDO）の委託業務「量子・古典ハイブリッド技術のサイバー・フィジカル開発事業／量子技術に関するユースケース事例調査」および「ポスト５Ｇ情報通信システム基盤強化研究開発事業（量子産業化）／量子コンピュータの産業化促進に向けた包括的調査」の成果として、得られたものです。