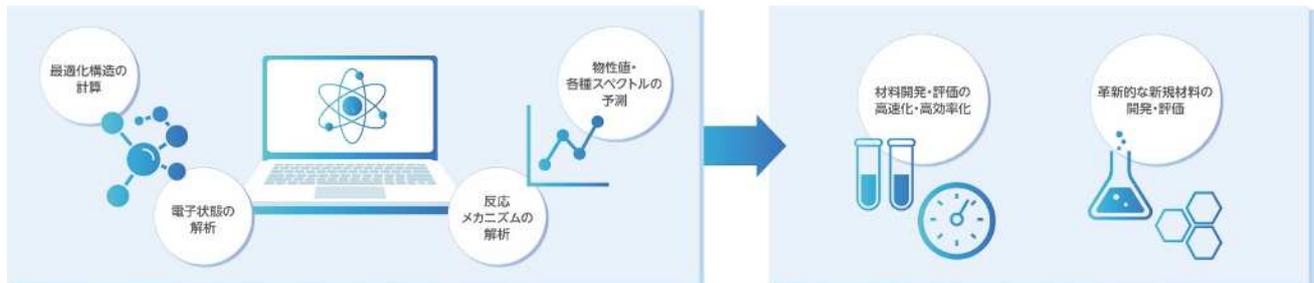


凸版印刷と大阪大学量子情報・量子生命研究センター、  
量子コンピュータを活用した材料開発・評価手法に関する共同研究を開始  
量子化学計算アルゴリズムを確立し、新規材料開発・評価の高速・高精度化を実現

凸版印刷株式会社(本社:東京都文京区、代表取締役社長:磨 秀晴、以下 凸版印刷)と国立大学法人大阪大学量子情報・量子生命研究センター(所在地:大阪府豊中市、以下 QIQB)は、量子コンピュータを活用した材料開発・評価手法に関する共同研究を、2023年3月より開始しました。

本共同研究では、凸版印刷が研究・開発に取り組む材料や製造プロセスの課題に対して、量子コンピュータを活用した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の演算を行い、量子化学計算アルゴリズムの開発と実証を行います。

凸版印刷と QIQB は、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、革新的な新規機能性材料の創出など、材料の研究開発 DX を推進し、産業と技術の発展に貢献します。



計算化学への量子コンピュータ活用イメージ

©TOPPAN INC.

## ■ 背景

量子コンピュータ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、多くの分野で研究が進められています。中でも、化学・創薬の分野は特に注目され、革新的な新規材料や新薬の創出などが期待されています。

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、時間のかかるものでした。しかし近年、機能発現のメカニズムなどを解明する計算化学や AI などが膨大な材料データを効率的にスクリーニングするマテリアルズインフォマティクス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ました。最近では、量子コンピュータの研究分野における活用もはじまり、この計算化学に量子コンピュータを利用することで、従来のコンピュータ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の期待が高まっています。量子コンピュータで計算した分子の構造や特性値は、マテリアルズインフォマティクス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ます。

このような課題に対し、凸版印刷と QIQB は共同で、量子コンピュータを活用して、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や様々な化学反応の解析シミュレーションなどの演算を行い、量子化学計算アルゴリズムの開発と実証を行います。

凸版印刷と QIQB は、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材料の研究開発 DX を推進し、産業と技術発展に貢献します。

## ■ 共同研究の内容

量子コンピュータを活用した材料開発・評価手法を確立するため、凸版印刷が製造業として長年にわたり蓄積してきた製造プロセスや材料に対する知見と経験を活用して、量子化学計算アルゴリズムの開発と実証を共同で研究します。

### (1) 量子化学計算アルゴリズムの開発と実証

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で実行するための量子化学計算アルゴリズムを開発します。これにより、従来のコンピュータでは計算できなかった分子の計算が可能となるか検証します。

### (2) 材料開発手法の確立

量子化学計算アルゴリズムを量子コンピュータに実装し、各種演算を実施し、材料開発手法を確立します。

このたびの凸版印刷と QIQB との共同研究は、JST 共創の場形成支援プログラム(COI-NEXT)量子ソフトウェア研究拠点における共同研究の一環として行われます。

## ■ 二者の役割

### ・凸版印刷

凸版印刷は「印刷テクノロジー」をベースに、「情報コミュニケーション事業分野」、「生活・産業事業分野」および「エレクトロニクス事業分野」の 3 分野にわたり幅広い事業活動を展開しており、製品の開発や製造事業を通し、製造プロセスや材料に対する知見とデータを培ってきました。本共同研究ではこのような知見を活かし、量子化学計算アルゴリズムの開発と実装に取り組みます。

### ・QIQB

QIQB は量子コンピューティング、量子情報融合、量子情報デバイス、量子通信・セキュリティ、量子計測・センシング、量子生命科学といった幅広い量子分野の研究に取り組んでおり、これらの分野間およびほかの学問分野との学際融合研究を推進しています。本共同研究では QIQB が保有する化学分野における量子コンピューティング技術を活用し、研究全体の統括・指導、計算環境の構築を行います。

<https://qiqb.osaka-u.ac.jp/>

## ■ 今後の展開

凸版印刷と QIQB は、量子化学計算アルゴリズムを開発し、量子コンピュータを活用した材料開発・評価手法を確立し、革新的な新規材料の創出を目指します。また、材料の研究開発 DX を推進し、産業と技術の発展に貢献します。

\* 本ニュースリリースに記載された商品・サービス名は各社の商標または登録商標です。

\* 本ニュースリリースに記載された内容は発表日現在のものです。その後予告なしに変更されることがあります。

以 上