

2025年度未踏ターゲット事業（量子コンピューティング技術を活用したソフトウェア開発分野）

量子アニーリングを活用したペロブスカイト結晶構造探索ソフトウェアの開発

— 結晶構造の離散最適化基盤の構築 —

深澤 亮（早稲田大学）

課題

結晶構造ファイル生成は材料計算研究の入り口！

- 混晶 × 有機配向 → 組合せ爆発
- 全探索 → 計算コスト膨大
- 従来の構造生成 → 破綻構造が多数生成

本プロジェクトのポイント

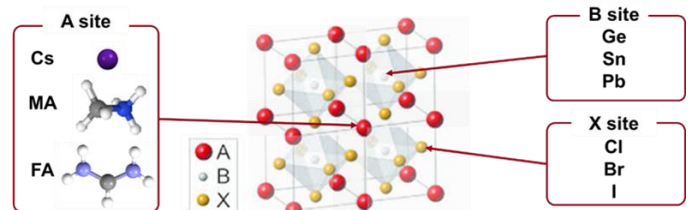
結晶構造生成を、原子を動かす問題ではなく、

「座席配置問題」として再定式化

QUBO式 ⇒ 量子アニーリング

題材: ペロブスカイトとは

次世代太陽電池材料・LED・触媒等に応用



本ソフトウェアの特徴

- Webから実行可能
- 混晶の原子配置と有機配向を同時最適化
- 機械学習ポテンシャルと連携



波及効果

- 結晶構造ファイル生成の高速化
- 材料開発のDX促進
- 優れたエネルギー材料の開発加速
- 量子アニーリングの実用事例として注目

成果

- 速度: 従来手法で数時間 → 本ソフトなら **十数秒!**
- 精度: **上位1~2%**の安定構造を特定!

※Cs₄MA₄Sn₄Pb₄I₂₄の4900通りの原子配置から探索した場合の例