

2026年 6月 1日

各 位

三井金属と Quemix、量子コンピュータ上での材料計算の新技术を開発 ～材料シミュレーションの実用化を加速～

当社（社長：池信 省爾）は、量子コンピュータのアルゴリズム・ソフトウェア開発を行う株式会社 Quemix（本社：東京都中央区日本橋、代表取締役 CEO：松下 雄一郎、以下 Quemix）との共同研究において、量子コンピュータを使った材料開発を大幅に効率化する新技术を開発しましたのでお知らせいたします。

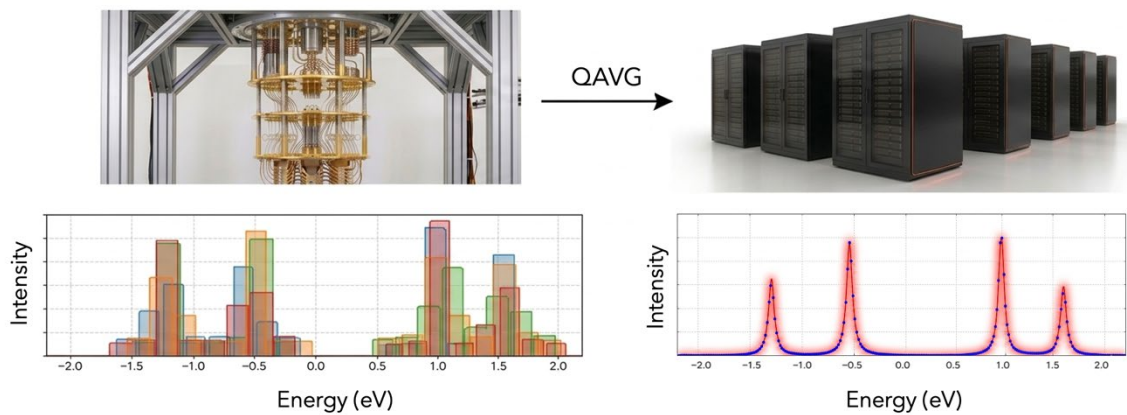
材料開発においては、高性能な新素材を探索するために多くの試行錯誤を要し、時間およびコストが課題となっています。こうした課題を解決する手段として近年、コンピュータシミュレーションの活用による材料開発の効率化が進められていますが、更なる解析精度の向上と計算時間の短縮を両立することが求められていました。この課題を解決する手段として量子コンピュータの活用が期待されています。

本研究では、高精度な計算が可能である一方、計算時間の長さが課題となっていた動的平均場近似（DMFT）法に着目しました。DMFT法を量子コンピュータ上で効率的に実行するため、新たな計算フローを構築するとともに、計算プロセスで重要な役割を担う量子位相推定（QPE）の性能を改善しました。これにより、高速性と高精度な計算の両立を可能にし、量子コンピュータを用いた DMFT 計算の早期実用化に目処をつけました。

今回開発した新技术「QAVG（QPE Averaged over Variable Grids）」は、量子コンピュータを用いた材料計算の基幹技術である量子位相推定（QPE）を改良した技術です。従来の QPE では、エネルギー分解能を高めるほどゲート操作数や計算コストが増加するという課題がありました。QAVG により、計算コストの増加を抑えながら、量子コンピュータ上での DMFT 計算を高精度化・高速化することが可能となります。

量子コンピュータからのサンプリング生データ

古典コンピュータによるデータ処理



図：QAVG の概念図。左下図：量子コンピュータ上で QPE を実行した結果得られた 4 種類のデータ（4 種類の色で区別）。右下図：量子コンピュータから得られた 4 種類のデータを基に、QAVG を実行し得られた連続スペクトル（青い点が実際の QAVG の結果であり、赤い線が厳密解）。

本共同研究では、Quantinuum 社の量子コンピュータ実機上で、触媒材料を想定したシミュレーションを行い、DMFT 計算フローの重要な構成要素である QAVG が、実機環境においても有効であることを確認しました。また、QAVG により、通常であればハードウェアの進化により約 2 年後に達成されると見込まれる計算精度を現行マシンで実現しました。これは、量子コンピュータを用いた DMFT 計算を実用的な材料シミュレーションへ応用する時期を前倒しできる可能性を示す成果です。更に、QPE は材料計算分野で広く用いられる技術であるため、本技術 QAVG は DMFT 計算にとどまらず、材料計算分野全体での応用と波及効果が期待されます。

両社は今後も、量子化学計算の実用化に向けたアルゴリズム開発を推進し、材料開発を通じた社会課題の解決に貢献してまいります。

なお、本研究成果については、2026 年 6 月東京にて開催される国際会議「Q2B 2026 Tokyo」(※)にて当社および Quemix の研究者が発表を予定しています。

以 上

※ Q2B 2026 Tokyo <https://q2b.qcware.com/ja/conference/2026-tokyo>

【お問い合わせ先】

三井金属 経営企画本部 コーポレートコミュニケーション部

TEL 03-5437-8028 E-mail PR@mitsui-kinzoku.com

【ご参考】

会社概要

1. 会社名	株式会社 Quemix
2. 設立	2019年6月
3. 所在地	東京都中央区日本橋2-11-2 太陽生命日本橋ビル
4. 代表者	代表取締役 CEO 社長執行役員 松下 雄一郎
5. 事業内容	量子コンピュータのアルゴリズム/ソフトウェア開発 材料計算プラットフォームおよびコンサルティング提供