

2026 年 6 月 3 日

Quemix と本田技術研究所、 マテリアル DX のコア技術である「密度汎関数計算」を 量子コンピュータ上で指数関数加速する新技術を開発

株式会社テラスカイ

株式会社テラスカイ(本社所在地:東京都中央区、代表取締役 CEO 社長執行役員:佐藤 秀哉)のグループ会社で量子コンピュータのアルゴリズム・ソフトウェアの研究開発を行う株式会社 Quemix(本社:東京都中央区日本橋 代表:松下 雄一郎、以下 Quemix)と、本田技研工業株式会社の研究開発部門である株式会社本田技術研究所(本社:埼玉県和光市 代表:秋和利祐、以下 本田技術研究所)は共同研究の成果として、マテリアル DX のコア技術である「密度汎関数理論(DFT)」の計算速度を指数関数倍に向上させる量子アルゴリズムの開発に世界初で成功いたしました。今現在、材料計算において基幹技術ともなっている DFT 計算の高速化はあらゆる材料開発に波及する極めて重要性の高いコア技術に位置付けられています。今回、共同研究の成果として DFT 計算を高速化する量子アルゴリズムを世界初で開発したことにより、従来のコンピュータでは到底実現し得なかった巨大なシステムを DFT 計算で実行できる可能性が拓けました。今後、本アルゴリズムを実務へと応用することで、本田技術研究所が注力する新素材開発のスピード加速へと繋げていけることが期待されます。

【背景:マテリアル DX の核心「DFT」と量子コンピュータへの期待】

近年、材料開発の現場では、従来の「経験と勘」に基づく実験主導型から、計算科学を駆使する「マテリアル・デジタルトランスフォーメーション(マテリアル DX)」への移行が急務となっています。このマテリアル DX の核となる技術が、電子状態計算手法である密度汎関数理論(DFT)です。DFT は、物質の性質を原子レベルで予測できるため、現代の材料設計において不可欠なツールとなっています。

一方、次世代の計算基盤として期待されているのが量子コンピュータです。量子コンピュータを活用することで、従来の古典コンピュータでは困難だったシミュレーションの「高速化」と「高精度化」を実現しようとする研究が世界中で加速しています。

【これまでの課題:高精度化への偏重と高速化アルゴリズムの不在】

これまで、量子コンピュータを用いた材料シミュレーション研究の多くは、「高精度化」に主眼が置かれてきました。これは、量子コンピュータが「電子間相互作用(電子同士の反発)」を厳密に扱う能力に長けているためです。

高精度化の対象: 電子間相互作用が非常に強い「強相関物質」や、光反応などの「励起状態」の解析。

課題: しかし、産業界で需要が高い創薬、半導体、電池材料などの多くは「弱相関物質」に分類されます。これらの材料計算においては DFT 計算でも十分であり、高精度化の方向性よりも、計算の高速化や大規模化が求められています。

さらに、マテリアル DX の本命である DFT 計算の高速化については、これまで有効な量子アルゴリズムが存在しませんでした。その理由は、DFT 計算特有の非線形な計算プロセスを、量子コンピュータの線形な演算体系に組み込むことが技術的に極めて困難であったためです。

具体的には、DFT 計算のプロセスに含まれる「グラム・シュミットの直交化法」は非線形演算であり、量子回路への実装における大きな課題となっていました。また、全エネルギーを評価する際にも、その表式自体が電子密度分布の非線形な汎関数として定義されるため、従来の手法では電子密度分布の逐次的な読み出し(サンプリング)が不可欠でした。この「読み出し」に伴う大きな計算コストもまた、実用化を阻む大きなボトルネックとなっていたのです。

【今回の成果:世界初の DFT 高速化アルゴリズムの開発】

今般、Quemix と本田技術研究所は、量子コンピュータを用いて DFT 計算を指数関数的に高速化する新しい量子アルゴリズムを世界で初めて開発することに成功いたしました。本アルゴリズムは、グラム・シュミットの直交化法を回避する新たな量子アルゴリズムを開発し、さらに DFT の全エネルギーを電子密度の読み出しをせずに、QPE(量子位相推定)回路のサンプリング結果から直接算出する手法を構築しました。これにより、世界で初めて電子密度分布の読み出しを必要としない、高速な DFT 計算スキームの構築に成功しました。

■ 実証実験の結果

開発したアルゴリズムをエミュレータ上で実行し、以下の点を確認いたしました：

指数関数的な加速：計算規模が大きくなるにつれ、従来のアルゴリズムに対し計算時間が指数関数的に短縮されることを確認。

従来手法と同等の精度：原子間距離や構造定数(結晶構造のパラメータ)の算出において、従来の DFT と遜色ない高精度な結果を得ることに成功。

高度な物性予測：材料の電氣的性質を左右する「電子バンド構造」の計算が可能であることを実証。

【今後の展望:産業応用のロードマップ】

本成果は、量子コンピュータの用途を一部の特殊な物質(強相関物質)から、半導体や電池といった汎用的な材料開発の領域へと一気に拡大させるものです。今後、本アルゴリズムの実機への実装を進めるとともに、パートナー企業との共同研究を通じて、次世代デバイスや新薬の開発期間を劇的に短縮する「真のマテリアル DX」の実現に貢献してまいります。

なお、このたびの共同研究成果は 2026 年 6 月 4～5 日にグランドハイアット東京で開催される量子技術の国際的なカンファレンスである「Q2B 2026 Tokyo」にて Quemix と本田技術研究所の研究者がケーススタディトラックに登壇し発表する予定です。

Q2B 2026 Tokyo(イベント公式サイト)

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

株式会社 Quemix について

Quemix は、株式会社テラスカイ(本社:東京都中央区、代表取締役:佐藤 秀哉)の連結子会社で、量子コンピュータ、量子センサ、材料計算関連の研究開発を行っています。「量子技術で人類が夢見た未来を実現する」というビジョン実現のため量子技術で時代をリードする企業のブレークスルーを支援していくことをミッションに、2019 年の会社設立時より誤り耐性量子コンピュータ(FTQC)向けのアルゴリズムにフォーカスした研究開発をしており、量子化学計算アルゴリズムとして数学的に量子加速が証明された「確率的虚時間発展法(Probabilistic Imaginary-Time Evolution、PITE®)」を開発・特許取得しております。日本における FTQC アルゴリズム研究分野をリードする Quemix では 2030 年を目標に材料計算・シミュレーション領域における量子コンピュータ実用化に向けて鋭意研究開発を進めております。

本件の Quemix によるプレスリリースはこちらをご覧ください
<https://www.quemix.com/post/20260603-hondard>

お問合せ先

【Quemix 事業に関するお問い合わせ】

株式会社 Quemix <https://www.quemix.com/contact>

【メディアの方からのお問い合わせ】

株式会社テラスカイ 広報担当 pr@terrasky.co.jp