

2026 年 10 月 28 日

TOPPAN ホールディングス株式会社

株式会社アイシン

旭化成株式会社

ソフトバンク株式会社

AGC 株式会社

DIC 株式会社

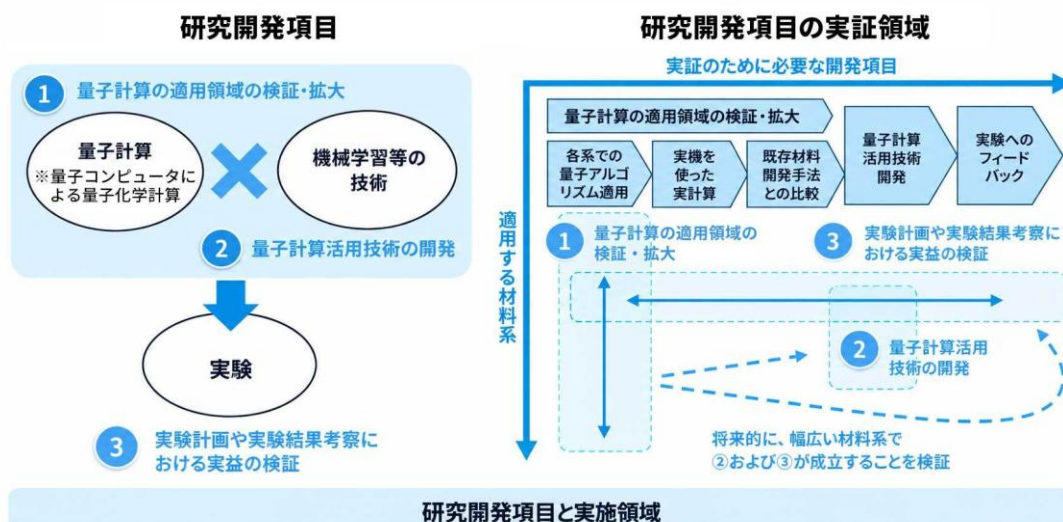
量子コンピュータを活用した材料開発基盤構築の研究を 6 社で開始

「量子技術を用いた革新的な材料開発基盤構築の研究開発」が NEDO に採択

量子コンピュータと AI 技術を統合し、ユースケース創出に向けた実証を実施

TOPPANホールディングス株式会社（本社：東京都文京区、代表取締役社長：大矢 諭、以下 TOPPANホールディングス）、株式会社アイシン（本社：愛知県刈谷市、取締役社長：吉田 守孝、以下 アイシン）、旭化成株式会社（本社：東京都千代田区、代表取締役社長：工藤 幸四郎、以下 旭化成）、ソフトバンク株式会社（本社：東京都港区、代表取締役 社長執行役員 兼 CEO：宮川 潤一、以下 ソフトバンク）、AGC株式会社（本社：東京都千代田区、代表取締役 兼 社長執行役員CEO：平井 良典、以下 AGC）、DIC株式会社（本社：東京都中央区、社長執行役員：池田 尚志、以下 DIC）の 6社は、NEDO（国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構）が公募した「ポスト5G情報通信システム基盤強化研究開発事業（社会課題解決に向けた量子コンピュータ次世代機開発・実証の加速）」における「ユースケース創出に向けた大型実証」の補助事業に対し、「量子技術を用いた革新的な材料開発基盤構築の研究開発（以下 本研究開発）」を共同提案し、採択されました。^{*1}

今回の採択により、6 社共同で協定書を締結し、2026年度から2028年度まで量子コンピュータを活用した新たな材料開発基盤構築の研究開発を行います。量子コンピュータによる計算を中核とし、機械学習をはじめとするAI(人工知能)技術と統合することで、実証から社会実装へと繋ぐ次世代の革新的な材料開発基盤の構築を目指します。



■ 本研究開発の背景

日本の化学・材料メーカーが今後も国際的な競争力を維持するためには、新しい材料の探索や開発効率を飛躍的に向上させる技術の確立が急務です。そこで近年、過去の材料データをもとに AI が新素材を予測・探索するデータ駆動型手法や、物理法則に基づいてシミュレーションする計算科学の活用が進展しています。しかし、データ駆動型手法には、高品質・高精度な学習データを十分に確保することが難しいという課題があります。また、計算科学には計算精度や計算規模を高めるほど計算コストが増大するという課題があります。

こうした課題への対応策として、量子力学の原理に基づいて動作する量子コンピュータの活用が期待されています。量子コンピュータは、同じく量子力学に従う分子や電子の性質を、従来のコンピュータよりも効率的にシミュレーションできる可能性があります。ただし、現状では量子ビット^{*2} 数やエラー率等に制約があるため、量子コンピュータ単独で大規模な計算を行うことは困難です。

本研究開発では、量子コンピュータを中核とした計算と AI を組み合わせることで、計算精度・計算規模における制約の緩和や計算コストの克服を可能にする手法を構築します。材料開発向け技術は、一つの特定制材料ではなく、産業的にニーズの高い幅広い材料系に対して横断的に適用し、6 社がそれぞれ強みを持つ異なる領域での検証を担います。さらに、量子計算の専門機関と連携することで、幅広い材料に対する量子計算の適用性検証を進めるとともに、産業活用に向けた実用的な価値創出に共同で取り組みます。

■ 本研究開発の概要

・研究開発項目

① 量子計算の適用領域の検証

次世代バッテリーの開発に必要な電池材料、新たなディスプレイやセンサーの開発に必要な光機能性材料、次世代デバイスの開発に必要な超電導材料等、産業ニーズの高い複数の主要材料系を対象に、量子計算の適用可能性を検証。

② 量子計算活用技術の開発

量子コンピュータを中核とした計算と AI を統合した技術を開発し、計算手法の適用範囲拡大や、従来の計算手法が抱える計算規模・計算コストの制約克服に向けた検証。

③ シミュレーションの実証と実験フィードバック

量子計算を含むシミュレーション結果をもとに材料の合成・性能評価を行い、実験結果とシミュレーション結果を比較することで、予測精度の向上や実用化に向けた量子計算の実益を検証。

■ 各社の役割

・TOPPAN ホールディングス

添加材料における量子アルゴリズムと古典アルゴリズムを組み合わせた手法を量子コンピュータで実行し、量子計算の適用を検証。量子計算と AI を組み合わせた手法の開発。実験結果のフィードバック。

・アイシン

超電導材料における量子計算の適用検証、既存材料開発手法との比較、材料開発現場における量子計算の実用化目途付け。

・旭化成

有機化合物（電解液など）や高分子材料、無機材料（電極など）における量子計算の適用検証から実験のフィードバックを通じて、材料開発現場の量子計算活用基盤の検証。

・ソフトバンク

量子コンピュータとスーパーコンピュータを連携させた計算基盤を活用し、材料開発に有用な高度データの生成と、AI 技術によるデータ活用技術の開発。次世代電池等のエネルギー関連素材をはじめ、幅広い領域における材料開発の効率化に向けた実証の推進。

・AGC

無機材料（光学硝材など）および有機材料（電子材料など）を対象とした、既存の計算科学や AI 技術と量子計算を組み合わせた材料開発手法の開発・評価、ならびにこれらを通じた材料探索や材料設計に資する知見の獲得と設計指針の構築。

・DIC

量子コンピュータ技術、シミュレーション技術、データサイエンス技術を融合し、色材や半導体材料で重要な材料特性を合成前に予測するなど、高性能な材料をより効率的に設計・開発するための新しい研究手法の構築と応用検証。

■ 今後の展開

本研究開発で得られた量子計算と AI に関するデータや実験データを統合し、継続的に進化する材料開発基盤の構築に繋げ、産業横断のイノベーション創出に貢献します。

*1 公募の詳細、実施体制の決定について：https://www.nedo.go.jp/koubo/CD3_100424.html

*2 量子ビット：量子コンピュータにおける情報の最小単位。

* 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