

クラウド型材料計算プラットフォーム「Quloud」新版を提供開始
～出光興産との共同研究成果を活用した分子動力学シミュレーション新技術を実装～

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、代表取締役:松下 雄一郎、以下「Quemix」)は、出光興産株式会社(本社:東京都千代田区、代表取締役社長:酒井 則明、以下「出光興産」)との共同研究を通じ、電池材料をはじめとする材料開発の効率化に資する分子動力学シミュレーション技術を開発しました。Quemix は本技術を実装したクラウド型材料計算プラットフォーム「Quloud(キュラウド)」の新バージョンの提供を、2026 年 9 月 16 日より開始しました。

■ 分子動力学シミュレーション新技術の開発背景とこれまでの課題

次世代電池の開発において、分子動力学シミュレーションは、試作コストの削減や開発期間の短縮に大きく貢献します。実用的な材料シミュレーションにおいては、「原子間力」と「電場から受ける力」の両方に対して、高速かつ高精度な評価が求められます。しかし、現在主流となっている手法では計算精度か計算速度のいずれかに制約があり、これが材料開発の効率化を阻む要因となっていました。

既存技術の特性比較と技術的制約

既存技術	メリット	デメリット	電場下の物質系における課題
コーンシャム密度汎関数理論 (KSDFT)	極めて高い計算精度	計算コストが原子数の 3 乗に比例して増大	数千原子規模のモデルに対する分子動力学計算は事実上不可能
汎用機械学習ポテンシャル	高速・大規模・高精度の計算が可能	一般的に原子の電荷情報を持たない。	電場から受ける力の評価が困難であり、電池材料への適用が限定的
オービタルフリー密度汎関数理論 (OFDFT)	計算コストがおおよそ原子数に比例して増大 大規模系の電荷評価を高速に実行可能	原子間力の精度が機械学習ポテンシャルに劣る	正確な原子間力評価が難しく、材料の構造安定性を担保できない

■ 共同開発した新技術の概要

Quemix と出光興産は、「OFDFT に基づく高速な電荷評価」と、「汎用機械学習ポテンシャルによる高精度な原子間力評価」を組み合わせた画期的なソフトウェアの共同開発に成功しました。

これにより、イオン結晶系やその接合系において、刻々と変化する電荷状態を追跡しながら、電場に駆動されるイオン伝導に対する分子動力学シミュレーションを実行することが可能となりました。



■ 期待される波及効果と今後の展開

本技術の確立により、電場下における固体電解質中や電極との界面における「イオンの運動」や「電荷変化」を直接的かつ動的にシミュレーションできるようになります。これは、リチウムイオン電池材料をはじめとする、様々なイオン系材料の開発スピードを劇的に加速させるものです。

Quemix は本共同開発によるシミュレーション技術を、クラウド型材料計算プラットフォーム「Quloud」の新機能として実装・提供を行います。Quloud の提供を通じ、最先端の材料開発に挑む企業や研究機関を強力に支援し、新材料開発の加速に貢献してまいります。

クラウド型材料計算プラットフォーム「Quloud」について

Quloud は、ブラウザ上で高度な材料シミュレーションを実行できるクラウド型材料計算プラットフォームです。第一原理計算や分子動力学計算などをシームレスに行える直感的な UI を備え、専門家から初心者まで幅広く利用できるサービスです。今後は独自の量子アルゴリズムや計算ソルバーを実装し、量子コンピュータを計算リソースとした次世代材料開発基盤として、製造業の材料開発を強力に支援します。

クラウド型材料計算プラットフォーム「Quloud」の詳細はこちら

<https://www.quemix.com/quloud>

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/20260917-quloud>

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。

本プレスリリースに関するお問合せ先

【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