量子コンピューティング ユースケース集

材料設計や反応解析の高速化プラットフォーム

三井物産



国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）

三井物産：材料設計や反応解析の高速化プラットフォーム【2025/8】1 ／ 2

構想

産業領域	製造・プロセス
プロセス	研究開発
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

取組の背景

- **創薬・材料・化学分野で、分子レベルの精度を要求する計算と実験の結びつきが重要になっている一方、量子計算の技術成熟度、人材不足、導入コストがボトルネックとなり、多くの企業が評価・検討段階に留まっている**
- 材料開発では、量子力学的なミクロ現象とマクロな製品性能をつなぐ複雑な計算プロセスが必要で、最先端の計算化学、量子計算、AIを連携する環境が求められる
- 三井物産はQsimulateの持つ古典計算ソフトウェアとQuantinuumの持つ量子計算ソフトウェアの強みを統合し、クラウド上で容易に活用できる量子・古典ハイブリッドプラットフォーム「QIDO」を提供開始

解決したい課題・モチベーション

- **分子設計の精度向上を通じて、創薬や材料開発に革新をもたらす技術として期待されている創薬、材料、化学の分野への量子コンピューター導入を促進**する
- 実用性の高い古典計算と先進的な量子計算をシームレスに接続することで、分子シミュレーションを高度化する

量子コンピューターとしての問題設定

- QSimulateの古典計算ソフトウェア「QSP Reaction」で高精度な化学反応解析を行い、Quantinuumの量子計算ソフトウェア「InQuanto」に適用することで、量子計算の活用を効率化

参照：三井物産株式会社：「創薬や材料開発の高速化を目指す量子・古典ハイブリッドプラットフォーム「QIDO」を提供開始」（ https://www.mitsui.com/jp/ja/topics/2025/1251846_14877.html ）
*ゲート（gate-based）= 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

三井物産：材料設計や反応解析の高速化プラットフォーム【2025/8】2 ／ 2

構想

産業領域	製造・プロセス
プロセス	研究開発
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

期待されるビジネス効果

- QIDOは、クラウド環境を活用することで、様々な研究テーマに対する試験的な解析を迅速かつ柔軟に実施できる環境の提供が可能となり、従来は専門知識が必要だった量子化学技術を、より多くの研究現場に普及促進
- ユーザーインターフェースと自動化された解析機能により、研究者は最適な手法を選び、効率的に研究を進めること可能となる
  - 企業や研究機関は量子技術の実装に向けた取組みを効率的に進められ、導入の加速に貢献
- **化学反応の経路探索や励起状態計算をはじめ、創薬、触媒・酵素設計、持続可能な材料、エネルギー技術などのユースケースが想定され、今後は電池技術やバイオ分野への応用も視野に入れ、各分野に特化した機能を順次拡張する予定**



QIDOのコンセプトイメージ

参照：三井物産株式会社：「創薬や材料開発の高速化を目指す量子・古典ハイブリッドプラットフォーム「QIDO」を提供開始」（https://www.mitsui.com/jp/ja/topics/2025/1251846_14877.html ）
*ゲート（gate-based）= 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

WEBサイトにて、その他の事例も公開しています。ぜひご覧ください。
https://www.quantum-computing-use-cases.nedo.go.jp

他の事例を見る

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）
AI・ロボット部（e-mail：quantum_ai@ml.nedo.go.jp）

本ユースケース集は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術開発機構（NEDO）の委託業務「量子・古典ハイブリッド技術のサイバー・フィジカル開発事業／量子技術に関するユースケース事例調査」および「ポスト５Ｇ情報通信システム基盤強化研究開発事業（量子産業化）／量子コンピュータの産業化促進に向けた包括的調査」の成果として、得られたものです。