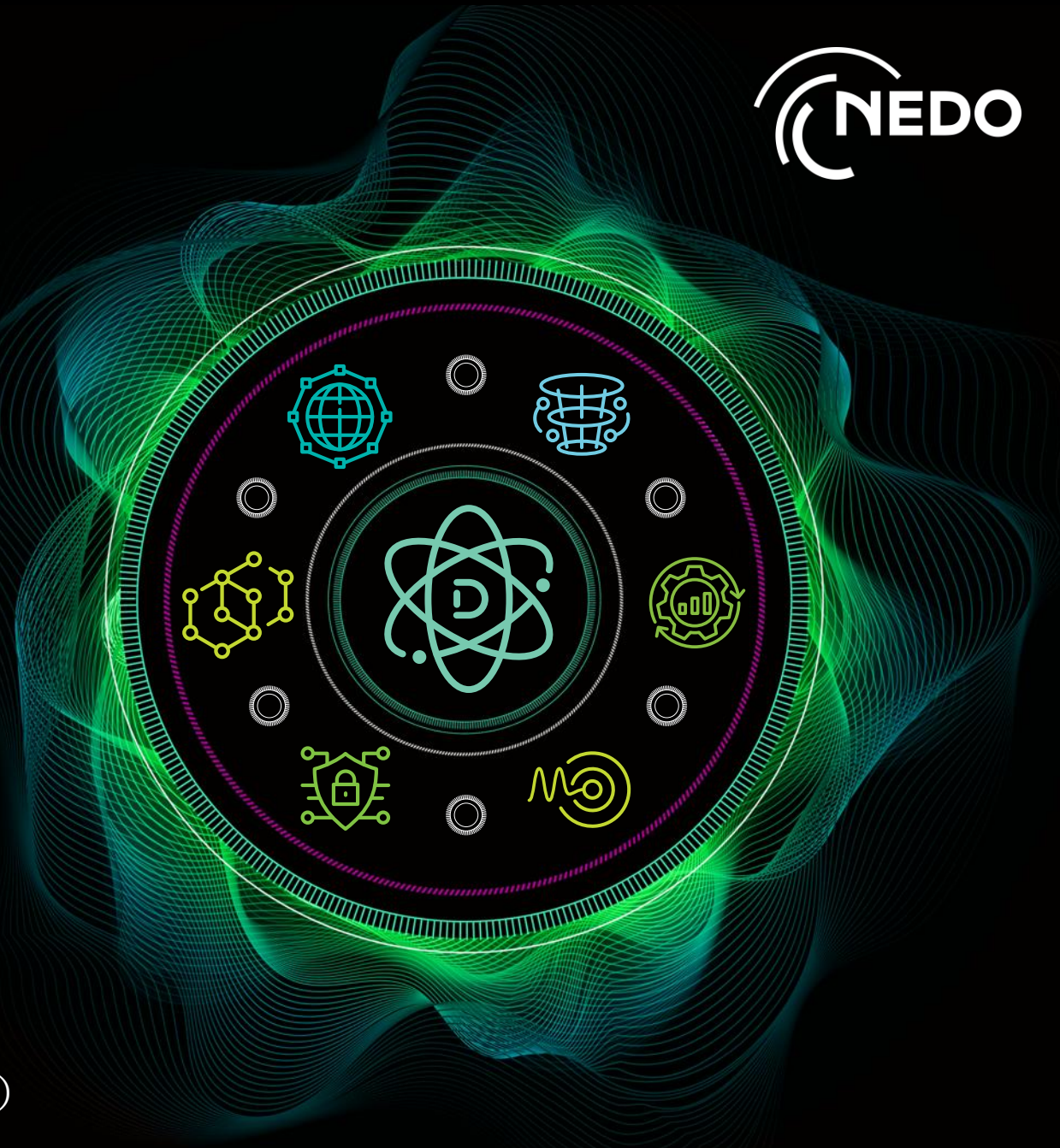
量子コンピューティング ユースケース集

材料開発・創薬に向けた量子–古典ハイブリッド分子動力学シミュレーション基盤



Quemix,デンソー

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）

Quemix×デンソー：材料開発・創薬に向けた量子–古典ハイブリッド分子動力学シミュレーション基盤 【2026/6】 1／3

検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	素材探索
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

取組の背景

- 材料開発や創薬では、**原子・分子レベルの挙動を計算で捉える分子動力学（MD）が重要**であり、電池、高分子材料、創薬、化学プロセス設計など幅広い分野で活用されている
  - ✓ MDは、原子・分子の運動を追跡し、材料物性や化学反応などを評価する計算技術である
- 一方で、**従来のMDは**多数粒子系を長時間追跡して統計処理する必要があるため、**高精度化に伴って計算負荷が大きくなりやすく、対象規模や計算時間に制約が生じやすい**
- こうした中でQuemixとデンソーは、**MD計算への量子計算の活用可能性を検証**するため、**量子–古典ハイブリッド分子動力学シミュレーションの枠組み構築**に取り組んだ

解決したい課題・モチベーション

- 従来のMDでは、**多数の軌道を長時間追跡したうえで統計処理を行う必要があり、計算負荷の大きさが課題**となる場合がある
  - ✓ 特に、拡散係数などの物性値を得るには、**多数の軌道を長時間追跡したうえで統計処理を行う必要**がある
- 量子コンピュータの活用可能性は以前から議論されていたが、実用的なMD計算の枠組みを構築するには、**分布関数の表現、温度・熱浴の取り扱い、物性値の読み出しが主要課題**であった
- このため本件では、量子コンピュータを活用した分子動力学計算のフレームワーク整備を進め、**化学状態予測への応用可能性を検証**した

参考：【プレスリリース】材料開発・創薬を支える分子動力学計算を量子コンピュータ計算基盤へ拡張（https://www.quemix.com/post/20260601-denso）
*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。

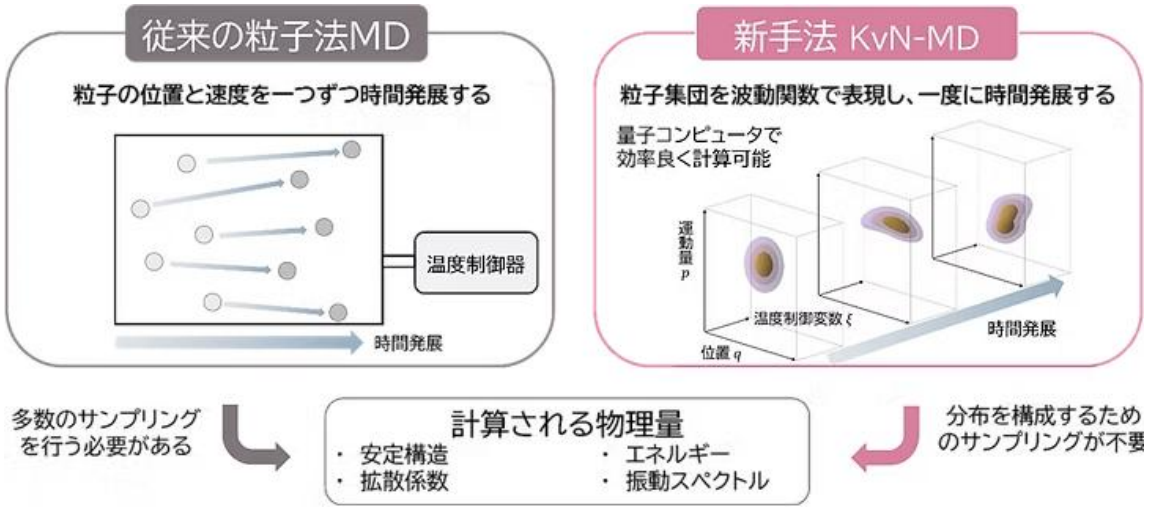
Quemix×デンソー：材料開発・創薬に向けた量子–古典ハイブリッド分子動力学シミュレーション基盤 【2026/6】 2／3

検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	素材探索
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

量子コンピューターとしての問題設定

- 古典的な分子動力学（MD）を、**分布関数を量子状態として表現し時間発展させるKvN形式へ再定式化し、量子–古典ハイブリッドMDフレームワークとして扱う問題設定**を行った
  - ✓ 具体的には、**MDをKoopman–von Neumann（KvN）形式**で記述することで、従来は軌道追跡と統計平均を通じて評価していた分布関数を、量子状態として直接保持・操作できるようにした



分子動力学シミュレーションの粒子法とKvN法の違いを表すイメージ図

- 加えて、**実環境の再現に必要な温度制御についても、量子回路上で扱えるように波動関数表現として再構築**
  - ✓ あわせて、実環境の再現に必要な温度一定（NVT）条件について、Nosé–Hoover型およびLangevin型の熱浴を量子回路上で扱う方法を検討し、Langevin型にはQuemixのPITE®を適用した。
- さらに、時間発展された分布関数から、**拡散係数や振動数状態密度（VDOS）を抽出する手法を構築**した
  - ✓ 読み出しには、用途に応じて**量子位相推定（QPE）や量子振幅推定（QAE）を用いる構成**とした
- そのうえで、高温環境下でのH_2解離を対象とする簡素な化学状態予測の概念実証に適用し、開発したフレームワークの実行可能性を示した

参考：【プレスリリース】材料開発・創薬を支える分子動力学計算を量子コンピュータ計算基盤へ拡張（https://www.quemix.com/post/20260601-denso）
*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。

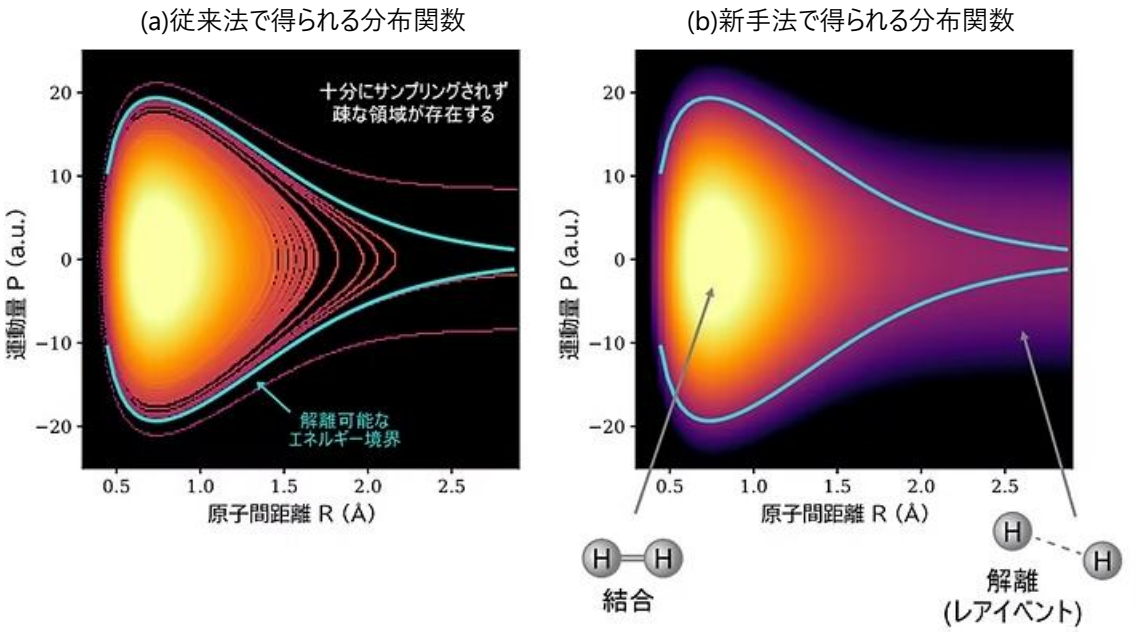
Quemix×デンソー：材料開発・創薬に向けた量子–古典ハイブリッド分子動力学シミュレーション基盤 【2026/6】 3／3

検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	素材探索
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

- **材料開発や創薬におけるシミュレーションの高度化・高速化が期待**され、拡散係数などの物性値をより直接的かつ効率的に計算できる可能性がある
- これにより、候補探索の効率向上、研究開発期間の短縮、試行回数の削減につながることが期待される
- 特に、次世代電池材料、高分子材料、触媒、創薬など、原子レベルの精密解析や機能性予測が求められる分野への応用が考えられる
- また、本件は**水素分子を対象とした概念実証であり、現時点では最小限のフレームワークを示した段階**だが、**将来的にはより複雑な系へ展開するための基盤技術として活用が期待される**



図：従来法と新手法(KvN)の比較。T=5000 KにおけるH2→H+H解離のレアイベントサンプリング
新手法(KvN)は、分布関数を直接量子状態として扱うことで、低負荷かつ高精度な化学状態予測の可能性を示した

参考：【プレスリリース】材料開発・創薬を支える分子動力学計算を量子コンピュータ計算基盤へ拡張（https://www.quemix.com/post/20260601-denso）
*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。