量子コンピューティング ユースケース集

創薬DXにむけた
反応中心電子動力学の量子ーHPC連携



京都大学/Quantinuum

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）

京都大学/Quantinuum：創薬DXにむけた反応中心電子動力学の量子ーHPC連携【2026/7】　1 ／ 2

検証

産業領域	創薬・医療
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

- **新薬開発**では、候補化合物の探索から有効性・安全性の検証までに多くの**時間とコスト**を要するため、研究開発の高速化と確度向上は、重要な経営課題である
- **探索の過程において、精度の高い薬物代謝や酵素反応**の理解は、候補化合物の**有効性・安全性・代謝特性**の見極めに直結し、結果として**候補選定や実験計画の効率化**に繋がる
- 新薬開発の成功確率向上と開発期間の短縮に向けて、**AI、データ解析、分子シミュレーション、HPCを活用した創薬DXプラットフォーム**の構築が進められている。しかし、**薬物代謝や酵素反応に関わる電子状態**は極めて複雑であり、従来の計算手法だけでは十分な精度で予測することが難しい場合がある。より**高精度に解析できる新たな計算基盤**である、**量子コンピュータの活用を検討した**
- 本取組は、**NEDO「計算可能領域の開拓のための量子・スパコン連携プラットフォームの研究開発」**における「**JHPC-Quantum Test User Program**」の一環として実施した

解決したい課題・モチベーション

- 薬物代謝や酵素反応を計算機上で予測するためには、反応中心における電子状態を適切に表現したモデルが必要である。しかし、**複数の電子状態が関与する複雑な反応**では、その**モデルの妥当性**を評価することは容易ではない
- 特に、**複数の電子状態が近いエネルギーを持ち相互に影響し合う領域**では、静的なエネルギー比較だけでは**反応モデルの妥当性や予測結果の信頼性を十分に判断できない**場合がある。そのため、電子状態の振る舞いをより詳細に解析し、**モデルや予測結果の信頼性を向上させる新たな手法**が求められている
- そこで本取組では、**量子状態の時間発展シミュレーションとの親和性が高い量子コンピュータ**に着目し、**高いゲート忠実度**や**柔軟な量子ビット接続性**を特徴とする**イオントラップ方式の量子コンピュータ**を活用した。HPCで構築した反応モデルに対して量子コンピュータを用いた電子状態の時間発展解析を行うことで、従来手法では把握しにくかった状態混合の特徴を診断し、**反応モデルの信頼性向上につながる新たな評価手法**を検証した

参考：創薬DXプラットフォーム（https://3dxpf.med.kyoto-u.ac.jp）
arXiv「A Quantum-HPC Hybrid Workflow for Reaction-Center Electronic Dynamics: Application to a Cytochrome P450-Inspired Iron-Complex Model」（https://arxiv.org/abs/2607.05786）
*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。

京都大学/Quantinuum：創薬DXにむけた反応中心電子動力学の量子−HPC連携【2026/7】　2 ／ 2

検証

産業領域	創薬・医療
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*

量子コンピューターとしての問題設定

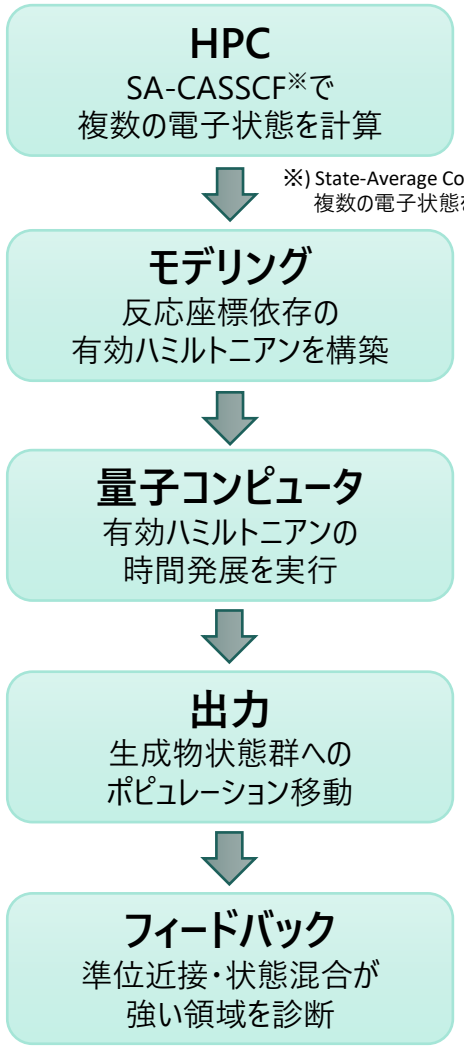
- **入力データ**
  - ✓ HPCを用いて算出した反応座標依存の有効ハミルトニアン
- **目的**
  - ✓ 有効ハミルトニアンの時間発展による電子状態の混合とポピュレーション移動の解析
- **評価指標**
  - ✓ 反応物状態から生成物状態群へ移ったポピュレーションの割合
- **古典手法で難しい理由**
  - ✓ 多数電子状態が関与する系では対象状態数の拡大に伴い計算コストが急増
- **量子コンピュータへの期待**
  - ✓ 有効ハミルトニアンの時間発展と動的なモデル診断への活用

期待されるビジネス効果

- **量子–HPCハイブリッドワークフローにより、従来手法では把握が難しい電子状態の変化を動的に解析し、薬物代謝反応の予測に用いる計算モデルの信頼性向上に活用できる可能性を示した。**将来的には、候補化合物選定や実験計画の効率化を支援し、新薬開発における研究開発生産性の向上、開発期間短縮およびコスト低減への貢献が期待される

参考：arXiv「A Quantum-HPC Hybrid Workflow for Reaction-Center Electronic Dynamics: Application to a Cytochrome P450-Inspired Iron-Complex Model」（https://arxiv.org/abs/2607.05786）
*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。

量子−HPCハイブリッドワークフロー



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。