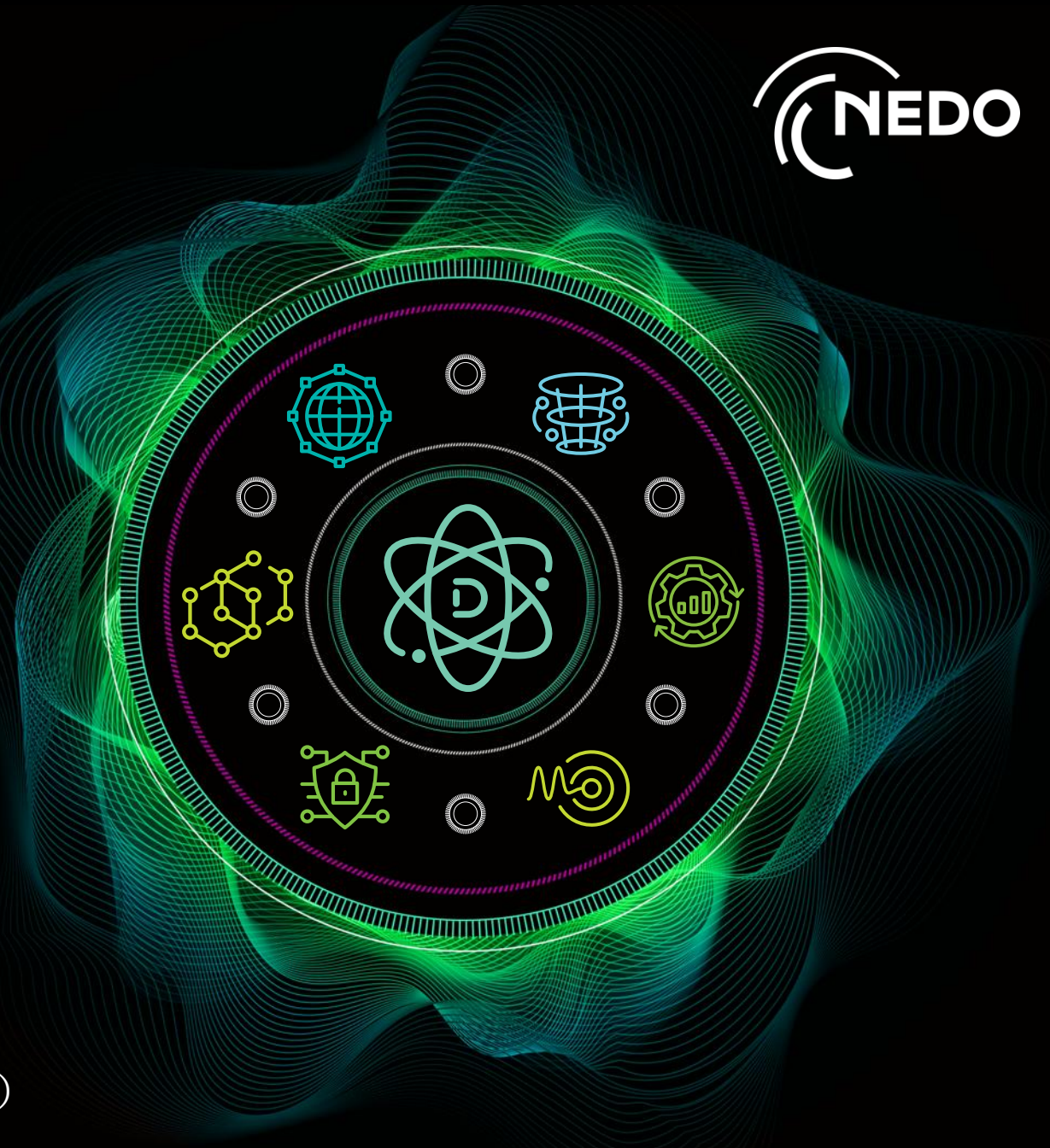
量子コンピューティング ユースケース集

FMOと量子コンピュータを統合した生体分子反応解析基盤の構築

大分大学/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）

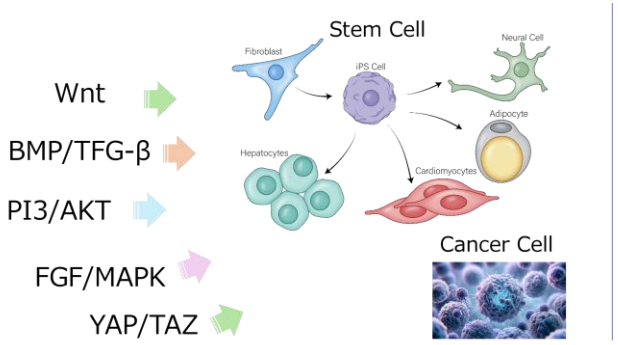
大分大学/Quantinuum：FMOと量子コンピュータを統合した生体分子反応解析基盤の構築 【2026/7】 1／2

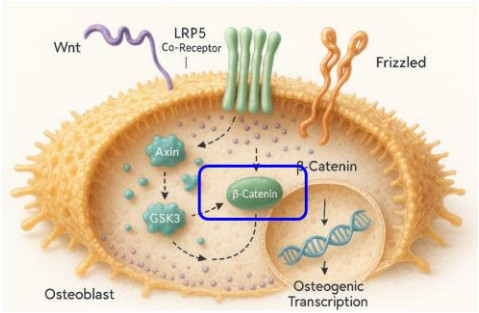
検証

産業領域：創薬・医療
プロセス：創薬ターゲット選定
手法：シミュレーション
技術分類：ゲート*

取組の背景

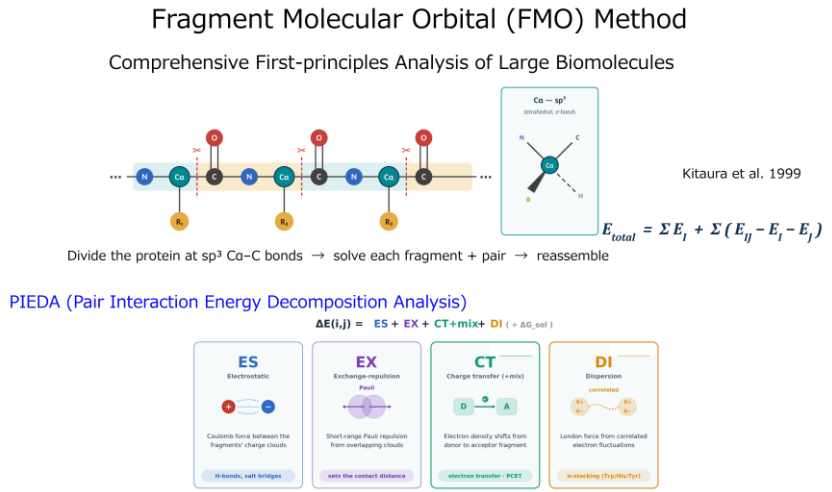
- がんをはじめとする疾患の研究では、**疾患関連タンパク質の機能や安定性を分子レベルで理解することが重要**である
- 本ユースケースでは、その一例として、細胞増殖や分化の制御に重要なタンパク質であるβ-cateninを対象とした
- β-cateninの異常や細胞内での過剰な蓄積は、がんの発症と深く関係している
- そのため、**β-cateninの機能を支える分子機構を理解することは、疾患メカニズムの解明や将来的な創薬研究につながる重要な課題**である





解決したい課題・モチベーション

- 生体分子の機能を理解するためには、**分子間相互作用や化学反応を高精度に解析する必要がある**
- **フラグメント分子軌道法（FMO法）は、大規模生体分子をフラグメントに分割して量子化学的に計算し、フラグメント間の相互作用の種類を解析できる有力な手法である**
- 一方で、生体分子中で重要な役割を果たす反応の電子状態をさらに高精度に理解するためには、より高度な解析が必要となる場合がある
- 本ユースケースでは、**FMO解析の結果を活用して量子コンピュータによる電子状態解析へ接続することで、生体分子反応解析のさらなる高度化**を目指した



参考：大分大学が量子コンピュータ「黎明」と「富岳」を用いた新たな創薬基盤を開発 ～JHPC-quantum テストユーザプログラムに採択～ | 理化学研究所 計算科学研究センター(R-CCS)

*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。

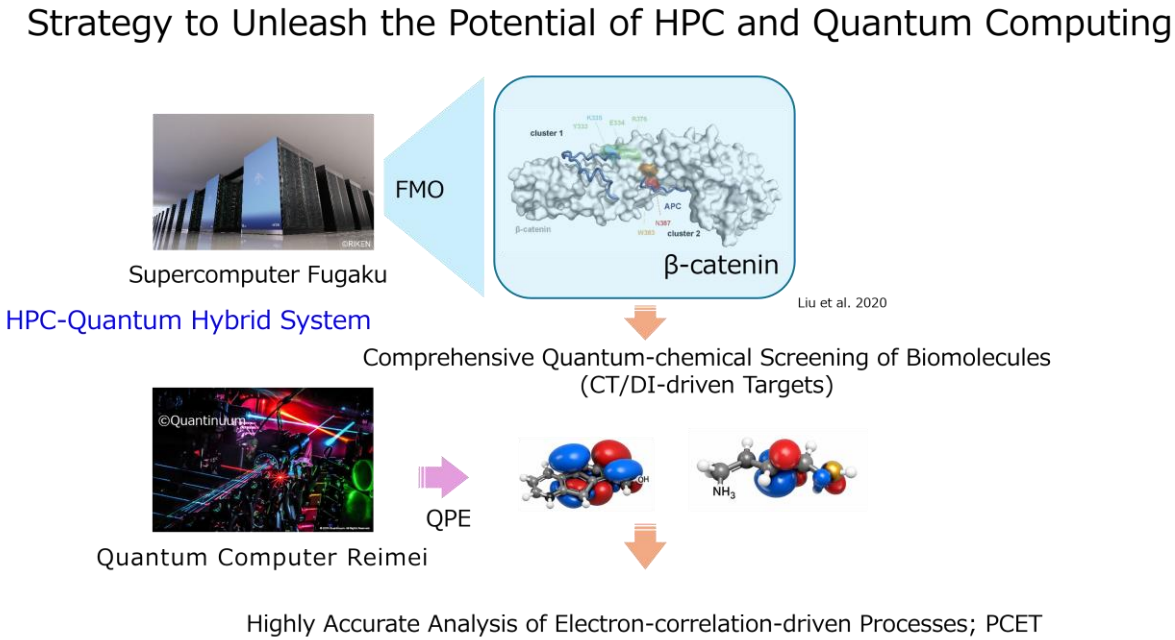
大分大学/Quantinuum：FMOと量子コンピュータを統合した生体分子反応解析基盤の構築 【2026/7】 2／2

検証

産業領域 創薬・医療
プロセス 創薬ターゲット選定
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

- まず、Protein Data Bankなどから得られる対象の生体分子の情報をインプットとして大規模なFMO計算をHPC上で行ない、そのフラグメント間の相互作用の内訳を解析することで、対象とする化学反応が起こる領域を絞り込むことが出来る。この結果をもとに量子コンピュータで扱うモデル系の構築を行なう
- 将来的に化学反応経路を得ることを念頭に置くと、ポテンシャル面の各点で高精度なエネルギー計算が必要となるが、電子相関が強く古典コンピュータ単体では計算コストが高くなってしまう箇所が存在するため、そのような電子状態計算に量子コンピュータを用いる
- エネルギー計算のための量子アルゴリズムとしては、**量子コンピュータのハードウェアの中長期期的な今後の発展を見据えて、量子位相推定(QPE)アルゴリズムを採用し、イオントラップ型の量子コンピュータの全結合性を活かした量子誤り訂正符号を用いた**



期待されるビジネス効果

- **本ユースケースで開発された解析技術は、β-cateninに限らず幅広い生体分子へ展開可能**である。生命科学・創薬分野における次世代シミュレーション技術の基盤として活用することで、以下のビジネス貢献が期待される
  - ✓ **候補化合物選定の確度向上**
  - ✓ **研究開発期間の短縮**
  - ✓ **実験・検証コストの削減**

*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。