量子コンピューティング ユースケース集

有機分子の結晶構造予測



Q-STAR
最適化・組合せ問題に関する部会
©2026　Q-STAR, Quantum STrategic industry Alliance for Revolution

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）

【実証済】有機分子の結晶構造予測

安定構造予測フロー

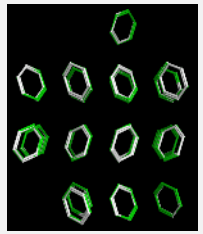
力場作成

安定結晶構造候補生成

安定結晶構造候補取得

安定結晶構造決定

ー原理計算など）



ベンゼンの結晶構造

ユースケース概要 Use Case Overview	製薬・材料分野における有機分子の安定結晶構造予測
解決できる課題と効果 Issues to be addressed and their effects	医薬品や機能性材料の安定性向上や効果の確保
量子技術の貢献 Contributions of quantum technology	分子結晶の安定構造予測フローにおける候補取得のステップ効率化

実現予想時期 Expected realization period	(Year)2025～2030
産業分類 Industry classification	製造（素材）
関連するQRAMI階層 Related QRAMI layers	機能層
関連する量子技術 Related quantum technologies	量子コンピュータ

新規性 Novelty	軽微な改良
達成難易度 Difficulty of achievement	容易
社会貢献度 Social contribution level	創薬・材料分野に貢献
市場規模 Market size	1,000億～1兆円

詳細

有機分子の結晶構造予測

解決すべき課題

- 医薬品や機能性材料の安定性や効果の確保のための有機分子の結晶の安定構造予測の高速化・効率化

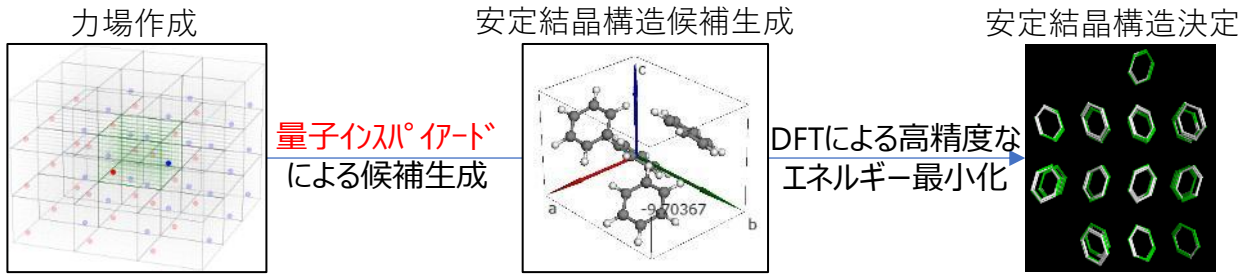
ユースケース概要

- 分子結晶の安定構造予測フローにおいて量子技術（量子インスパイアド）により候補取得を効率化

実現イメージ

実現目標時期：2025～30年

安定構造予測フロー



- 医薬品や機能性材料の設計における安定構造予測で、安定結晶構造候補生成を効率化・高速化

期待される効果

- 医薬品や機能性材料の安定性や効果を確保するための設計を効率化
- 医薬品上市後に、別の安定結晶が製造中に出現するようなことによる損失防止
- 新規機能性材料の実現

アクションプラン

QRAMI階層	アクション
Business	製薬・材料分野での利用拡大
Function	多様な有機分子への適用技術・新規機能性材料設計での応用技術確立
Information	予測データの蓄積・データベース化及び活用
Integration	量子インスパイアード・FTQC・HPCの統合
Asset	量子インスパイアード・FTQC・HPC

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。