

三井物産、QSimulate、Quantinuum が「QIDO」を発表：
～創薬および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 は高性能な量子化学計算ワークフローと量子コンピューティングを統合し、製薬、エネルギー、化学など多岐にわたる分野で、分子発見から市場投入までの期間短縮を目指す

2025 年 8 月 19 日、東京 – 三井物産株式会社（以下、三井物産）、QSimulate、および Quantinuum は、本日、新たな製品として量子古典ハイブリッドプラットフォーム「QIDO（キド：Quantum-Integrated Discovery Orchestrator）」を発表しました。本プラットフォームは、新薬や新材料の開発にかかる時間とコストを削減することを目的としています。QIDO は、高精度な化学反応モデリングを通じて研究開発を高速化し、最先端の古典コンピューティングと量子コンピューティングの利点をシームレスに組み合わせます。

商業的なインパクトを創出するために構築された QIDO は、複雑な量子古典ハイブリッドワークフローを合理化し、企業が開発プロセスのより早い段階で意思決定を下すことを支援することで、イノベーションにおける強力な優位性の獲得に貢献します。本プラットフォームは、先端材料設計、クリーンエネルギー、創薬を含む、化学を基盤とする幅広い分野の研究を支援するように設計されています。

QIDO を支える独自技術

QIDO は、古典量子化学における最高精度の手法と数千原子規模の計算を可能にする技術をバックエンドにもつ QSimulate の反応解析プラットフォーム「QSP Reaction」と、Quantinuum の「InQuanto」をシームレスに統合しています。InQuanto は、最先端の量子エミュレータおよび Quantinuum の量子コンピュータ「Quantinuum Systems」へのインターフェースを提供し、オープンソースの代替ソフトウェアと比較して、複雑な分子や材料のシミュレーションにおいて最大 10 倍の精度向上を実現します。

三井物産 量子イノベーション室 室長である越田誠氏は次のように述べています。「私たちは市場のニーズに基づいたアプローチをとり、お客様が今日の課題を解決するための実用的な機能を提供することと、来たる量子時代に備えることの両立を目指しています。このアプローチにより、お客様は量子技術が本格的に実用化されるその日から、その利点を最大限に享受することが可能になります。」

QSimulate CEO である塩崎亨氏は次のように述べています。「最先端の量子化学シミュレーションと量子コンピューティングの深い専門知識を組み合わせることで、QIDO は産業界の化学者に対し、複雑な化学的課題に迅速かつ正確に取り組むための強力な直感的なアルゴリズムとツールを提供します。量子化学の自動化における長年の革新と、量子計算の未来との融合に、大きな期待を寄せています。」

Quantinuum CEO である Rajeeb Hazra 氏は次のように述べています。「化学分野における量子ネイティブシミュレーションの化学的精度と計算効率の飛躍的向上を加えることで、創薬やエネルギーなどの重要市場における科学的発見の経済性を大きく変革する画期的な一歩となります。Quantinuum は、この革新を実現する本取組に対し、業界最高性能の量子コンピュータと世界的に広く採用されている量子化学計算ソフトウェア - InQuanto - を提供できることを誇りに思います。」

QIDO のユースケースと将来の拡張

QIDO は、いわゆる活性空間アプローチに基づいた高精度な化学反応解析モジュールと共に提供が開始されます。想定されるユースケースは以下の通りです。

- **触媒および酵素設計**：複雑な電子挙動のシミュレーションによって、高効率な触媒・酵素の設計を支援。クリーンエネルギー、環境配慮型製造、高度なバイオ触媒（創薬、食品加工、バイオ燃料等）への応用を促進。
- **反応機構の解明**：反応中間体や励起状態を含む複雑な化学反応経路の理解を深化。材料の安定性・性能・寿命の向上に貢献。
- **電池効率とエネルギー貯蔵**：電池材料とその性能の強化によって、安全性向上・長寿命化・大容量化を実現。
- **持続可能な材料とエネルギー**：省エネ材料の開発促進、二酸化炭素の回収・再利用の改善、グリーンアンモニアおよび水素製造の支援。

QIDO は、電池の技術革新や創薬といった、産業に影響の大きいユースケースにおけるイノベーションを加速させるため、順次、機能が追加されます。これらの分野における量子技術を通じた革新は、お客様との「協創」を通じて実現されます。

業界リーダーからの反響

QIDO の日本における独占販売代理店として、また将来の「協創」を見据えた戦略的パートナーとして、三井物産は国内での販売・流通を主導し、その後のグローバル展開の基盤を築いています。日本市場での QIDO の一般提供を開始する前に、三井物産は業界をリードする企業 3 社とベータテストを実施しました。

- JSR 株式会社 リサーチフェロー RD テクノロジー・デジタル変革センター マテリアルズ・インフォマティクス推進室 次長 大西 裕也 様は次のように述べています。
「QSimulate 社が提供するプラットフォームは、インプットの簡便さやエラー処理の自動化、必要な情報に絞ったアウトプットにすることで、計算のハードルを下げ、今や JSR では有機合成化学者が日常的に使うツールになっています。今回このプラットフォームが拡張し、InQuanto により量子コンピュータ上での量子化学計算に対応することで、量子アドバンテージをいち早く享受できることが期待されます。」

- パナソニックホールディングス株式会社 GX 本部 グリーンイノベーションセンター シニアリードリサーチャー 大越 孝洋 様は次のように述べています。

「本プラットフォームは、ユーザーが直感的な GUI を活用しながら、化学反応シミュレーションを実行できるツールです。誤り耐性量子コンピュータの本格的な実用化が進む将来において、材料シミュレーションは有望なアプリケーション領域とされており、量子コンピューティングとも統合された本プラットフォームは、そのブレイクスルーに備えた先行的な検証の機会を提供するものと期待されます。」

- 中外製薬株式会社 デジタルソリューション部データサイエンスグループ データサイエンティスト 荒川 晶彦 様は次のように述べています。

「本アプリケーションは、直感的な操作性と一目で理解できる結果表示機能を備えたインターフェースが実装されており、これまで以上に容易に化学反応経路探索が実行できるようになると期待されます。創薬・製薬研究で実際に扱う複雑な分子の計算において、いくつかの技術的課題を認識していますが、今後これらの課題が着実に解決されることで、複雑な化学構造を持つ開発候補分子の合成・製法検討が加速・効率化され、本アプリケーションが創薬・製薬研究の加速に貢献することを期待しています。」

QIDO の主な機能

QIDO は、高精度な化学モデリングを効率化するための様々な機能を搭載しています。これにより、専門家向けだった量子化学技術を、産業の現場でより手軽に利用できるようになります。

- 指定された反応物と生成物から、反応座標と遷移状態を自動的に特定
- 量子エンベディングと自動化された活性空間選択技術を用いて、強相関係をコンパクトなハミルトニアンにマッピング
- 精度とコストのバランスをとるため、カスタマイズ可能な活性空間と計算手法をサポート
- 量子コンピュータおよびエミュレータを使用して、反応物、生成物、遷移状態の最適化されたエネルギー計算を提供
- 量子回路を可視化し、計算に必要な量子リソースを報告

ご購入、トライアルのお申込み、その他詳細につきましては、<https://mitsui-q.com/ja/qido/>をご覧ください。

三井物産について

三井物産は、60 以上の国・地域に拠点をもち、多様な事業ポートフォリオを広範な産業分野で展開するグローバルな総合商社・事業投資会社です。世界有数の企業を含む信頼されるパートナーとのグローバルネットワークと連携し、地域や産業分野を横断する強みを活かして、ステークホルダーのために長期的に持続可能な価値を創造する事業を特定、開発、成長

させています。

三井物産は現在の中期経営計画において、3つの主要な戦略的イニシアチブを掲げています。資源・素材の安定供給とインフラ提供による産業の成長と進化の支援、低炭素・再生可能エネルギーへのグローバルな移行の推進、そして質の高いヘルスケアと栄養へのアクセスの提供を通じた人々の健康的な生活の支援です。

詳細については、<https://www.mitsui.com/jp/ja/index.html> をご覧ください。

QSimulate について

2019年に設立され、マサチューセッツ州ボストンに本社を置く QSimulate は、材料開発およびライフサイエンス分野における量子シミュレーション技術のリーダーです。同社は、量子力学の力を活用して、これまでにない方法で産業規模の問題を解決するために設計された、さまざまな製品とサービスを提供しています。

詳細については、<https://qsimulate.com/> をご覧ください。

Quantinuum について

Quantinuum は、量子コンピューティングにおける世界的リーダーです。同社の量子システムは、主要な業界ベンチマークにおいて最高のパフォーマンスを提供しています。米国、英国、ドイツ、日本に拠点を置く 550 人以上の従業員（うち 370 人以上が科学者およびエンジニア）が、量子コンピューティング革命を推進しています。

詳細については、<https://www.quantinuum.com/> をご覧ください。