



分子科学研究所所長招聘会議 公開シンポジウム 『AI for Chemical Sciences』

はじめに

日本学術会議化学委員会・化学企画分科会では、社会と学術に関わる重要課題を取り上げる場として、分子科学研究所（以下、「分子研」と記載）および日本化学会戦略企画委員会と共同で、分子科学研究所所長招聘会議を毎年開催してきた。2026年度は、6月11日(木)に分子科学研究所研究棟での対面形式とZoomによるオンライン参加を組み合わせたハイブリッド形式により、公開シンポジウム「AI for Chemical Sciences」を開催した。対面では47名、オンラインでは約240名（一部重複含む）が参加した。

本シンポジウムでは、近年急速に発展しているAIが化学および周辺分野に与える影響を見極め、研究・教育・産業・製作の各領域がどのように対応すべきかについて、広い観点から議論することを目的とした。当日は、5件の講演および総合討論が行われた。

プログラムは次のとおりである。

13:30 開会挨拶 山本浩史（日本学術会議連携会員、分子科学研究所研究総主幹）

13:45 化学委員会報告および趣旨説明 岡本裕巳（日本学術会議第三部会員、分子科学研究所名誉教授）

14:00 「AI、ロボット時代の化学研究と人材育成」一杉太郎（日本学術会議連携会員、東京大学大学院理学系研究科教授）

14:30 「企業の研究開発におけるAI」森田秀和（株式会社日立製作所フロンティアサービス事業統括本部サービス事業創生

本部本部長）

15:20 「創業標的分子の探索AI」難波里子（名古屋大学高等研究院・大学院情報学研究科特任助教）

15:35 「創業におけるAI研究とAI人材育成」山西芳裕（名古屋大学大学院情報学研究科教授、愛知県がんセンター研究所異分野融合研究開発分野分野長）

16:00 「マテリアル革新力強化戦略推進方策始動～知のバリューチェーン×AI for Materialsで勝ち続ける」服部 正（内閣府科学技術・イノベーション推進事務局参事官、文部科学省研究振興局参事官）

16:30 総合討論（司会）鈴木朋子（日本学術会議第三部会員、株式会社日立製作所 専門理事/研究開発グループ技師長）

（役職は講演当時）

開会挨拶

冒頭に、山本氏から、開会挨拶に続き、分子研における、AIとサイエンスの融合を目指す新たな取り組みが紹介された。

分子研では、統合型スマートクラウド実験基盤の構築を進めており、実験装置や研究分野で分断されたデータを相互接続可能な形で整備することで、異なる階層やモダリティを横断した相関発見が期待される。AIを研究に本格活用するには、大量かつ多様なデータをどのように収集・共有・標準化するかが重要であり、今後は、分子研における共同利用・共同研究体制や多機関連携の強みを生かし、情報系・ロボット系・装置メーカーなどとも連携しながら、マルチモーダル



分子科学研究所所長招聘会議 2026 ポスター

な研究環境の形成を目指す。

一方で、AIの活用が進んでも人間の役割が失われるわけではなく、ゼロからイチを生み出す問いの設定や創造的発想こそが重要であり、そのための人材育成には、大学、研究機関、企業との協働が不可欠である。

化学委員会報告および趣旨説明

続いて岡本氏から、化学委員会の活動状況と本シンポジウムの趣旨説明があった。

化学委員会は、化学を「セントラルサイエンス」と位置付け、分野横断的・国際的な課題の審議、国際学術団体への対応、分科会活動、シンポジウム開催、見解・報告の取りまとめなどを担っている。

本シンポジウムの趣旨は、AI技術の最新動向を紹介するだけでなく、AIが今後の化学研究にどのような変化をもたらすかについて、産学官の枠組みを超えて多角的に議論し、将来への展望を共有することを目指すものである。

講演

1. 「AI、ロボット時代の化学研究と人材育成」（一杉太郎）

一杉氏の講演では、AIとロボットが研

究開発の現場にもたらす変化と、それに対応する人材育成の在り方が論じられた。



一杉太郎氏

2020 年 前 後
を大きな転機として、従来の自動化に加えて、AI 自身が次の実験を提案し、ロボットが実行する「自律化」が発展してきた。この世界的な潮流の中で、日本はフィジカル空間（実験現場）における高い技術力や、信頼性の高いデータを生み出せるという独自の強みを持つ。今後は、このフィジカル空間の優位性をサイバー空間（情報基盤）と結び付け、各国と補完関係を築きながら世界的な頭脳循環を主導する戦略が、日本の競争力強化に極めて重要となる。

AI やロボットの導入は、研究者の仕事奪う存在ではなく、人間がより創造的な活動に集中するための道具であると捉えるべきである。その上で最も重要となるのは、研究プロセスの「どこを自動化し、どこを人間が担うか」を見極め、研究環境全体を設計・デザインできる能力である。

次世代のデジタル人材育成においては、大学院だけでなく学部段階から実践的なデジタル教育を導入し、科学と情報の融合領域を具体的に学べる環境を作ることが必要である。その目的は、高度なアルゴリズム開発者の育成ではなく、機械学習を理解・活用し、データ科学の専門家と対話しながら課題解決できる人材を育てることにある。企業の最先端課題

を解決する実践教育や長期滞在型プログラム、ロボットなどの実物に触れる機会、実践力と発想力を高める上で有効であり、産学連携による教育資金確保にもつながる。その際、人材育成において、学生一人一人の適性を見極めながら、それぞれの強みを伸ばす視点が重要である。

将来的には、生成 AI や AI エージェントが、研究開発に必要なシミュレーション、実験、さらにはレポートの自動作成までをシームレスに接続し、研究者の発想を広げる存在になると考えられる。AI とロボットを自在に活用し、仮説検証を行う新しい研究者像が生まれる。優れた自動化システムの構築には、実験現場のプロセスや課題を深く理解していることが不可欠である。そのため、自動化が進展しても、研究者が自ら実験を理解し、手を動かす経験を積むことが、引き続き極めて重要である。

今後の化学研究では、若手だけでなく教授層や組織のマネジメント層も AI の可能性と限界を理解し、自らの役割を再定義する必要がある。AI とロボットによる探索空間の拡大を、人間の創造性を広げるものとして前向きに捉える姿勢が、研究の発展を支える鍵となるだろう。

2. 「企業の研究開発における AI」（森田秀和）

森田氏の講演では、企業の研究開発における AI 活用の現状と課題について紹介がなされた。

現在、すでに多くの企業が、研究開発にマテリアルズ・インフォマティクスなどのデータ駆動型アプローチを導入して

いるが、実務上の課題は、データの収集・管理・分析を次の実験へと一貫して接続するという、プロセスの

統合にある。製造現場には、熟練者の暗黙知に依存している工程がいまだに多く存在している。このような技術の確実な継承を AI で支援することは、企業の持続的成長に直結する。

（株）日立製作所では、フィジカル空間のデータを AI で処理し最適化する「フィジカル AI」の考え方を、製造や研究開発の現場へ広げている。材料開発から製造プロセス、量産化までの工程を対象に、AI が最適なプロセスを探索・提案する仕組みを構想している。最終的には、生成 AI インターフェースを通じて、プロセスの探索から計測、解析、提案までが「AI エージェント」としてシームレスにつながる形を目指している。しかし、実際には、中間工程の多くにまだ人間が介在せざるを得ず、完全自動化に向けた技術的・運用的な課題が残されている。

また、企業が AI を活用する上で極めて重要なテーマである「機密情報の保護」に関して、論文や特許などのデータは企業にとって貴重な財産であると同時に膨大な機微情報を含んでいるため、公開されているデータは共通のプラットフォームで処理し、企業固有の非公開データは顧客側の環境に保持したまま個別 AI を構築する、といったセキュリティと利便性を両立する工夫が求められる。論文や



森田秀和氏

特許などそれ自体のデータ処理に関して言えば、文章データ特有の「文体特性(または揺らぎ)」の解析に高度なノウハウも必要とされる。

さらに、人間の「アイデア発想支援ツール」の開発・活用を進めている。これは、AIが最初に提示する複数のアイデアに対して、人間が選択やフィードバックを重ねることで思考の発散と収束を繰り返し、最終的に斬新な新発想へと到達するプロセスを支援するもので、将来的にはこの技術を社会課題の探索や代替案の生成のみならず、自然科学における仮説生成支援にも応用していきたいと考えている。

自然科学の世界において、最終的な法則や仮説の選択およびその立証を担うのは人間の役割である一方、その前段階における広範な候補の生成や、人間の盲点を突くような視点の拡張においては、AIが極めて有効な力を発揮する。こうした企業内サービスに留まらない新たな価値創造を達成するためにも、アカデミア(大学・研究機関)との連携をより一層強めることが不可欠と言える。

3. 「創薬標的分子の探索 AI」(難波里子)

難波氏の講演では、創薬研究の初期段階において重要かつ困難な創薬標的分子の探索にAIを活用する取り組みが紹介された。

近年、創薬標的分子の探索において、AIや機械学習を活用した新たなデータ

駆動型アプローチが導入され、従来の創薬プロセスを根本から変革しつつある。

従来の創薬研究では、既知の情報や研究者の経験則に基づいて標的を選定することが多く、十分に研究が進んでいない未開拓の領域や複雑な疾患の各要素間の相関関係が不透明な状況に対しては、アプローチが難しいという課題があった。

これら課題を克服するため、遺伝子情報やタンパク質の挙動、分子構造特性など、多角的な大規模データを組み合わせ、AIを用いて統合的に解析することで、疾患に関わる分子パターンや未知の関連性をデータから効率的に抽出することが可能となる。

本アプローチの最大の主眼は、AI技術が、研究のスピードを加速させるだけでなく、人間の先入観やこれまでの知見だけでは捉えきれなかった未知の標的候補を的確に絞り込むことができる点にあり、複数の生物学的情報を統合して最適な標的候補を見いだす非常に有効な手段として期待される。

4. 「創薬におけるAI研究とAI人材育成」(山西芳裕)

山西氏の講演では、創薬AI研究の全体像と人材育成が取り上げられた。

創薬AI研究は、既存データを活用する「データ解析型」と、新たな分子や薬効を生み出す「生成型」に大別される。

データ解析型では、大規模医療データ

などから薬の服用と疾患・副作用の関係を統計的に解析し、人間の先入観では結び付きにくい既存薬の新たな効能の発見につながっている。予測された候補薬がどのタンパク質に結合するかを推定し、疾患との関連を深掘りした実例として、既存薬から新しい皮膚疾患治療の可能性を予測し、マウスモデルで症状改善を確認した事例もある。

一方、生成型研究は、深層学習を用いて膨大な化学空間から新規性の高い候補構造を設計するもので、学習データが少ない未開拓領域での構造生成には課題があるものの、制御対象のタンパク質や既知化合物の特徴を組み合わせる手法により、老年病関連の標的において既存薬を上回る活性を持つ候補分子の設計に成功した事例もある。

さらに、タンパク質立体構造予測に関して言えば、薬とタンパク質の結合解析やタンパク質立体構造予測の進展により、新たな疾患適応や薬効クラスターの発見も可能になりつつある。

創薬AIの現場で求められるのは、生命科学や化学の本質的課題を理解した上でAIを使いこなせる人材である。実際に、単に情報科学だけを教えるよりも、本質的課題を持つ研究者にAIを習得させる方が、長期的には分野に定着しやすい傾向が見られている。また、現在の生命科学分野におけるAI実用化は、長年の地道な基礎研究の蓄積によって支えられており、今後も基礎研究を継続することが重要である。

5. 「マテリアル革新力強化戦略推進方策 始動～知のバリューチェーン×AI for



難波里子氏



山西芳裕氏

Materialsで勝ち続ける」(服部 正)

服部氏の講演では、マテリアル分野における国の戦略とAI for Materialsの推進方策が説明された。



服部 正氏

政府は、日本の学術的・経済的な強みであり、かつ基幹産業でもあるマテリアル分野において、国際競争力を維持・強化するため、「マテリアル革新力強化戦略」を進めている。その中核となるのが、産学官をつなぐ「知のバリューチェーン」の構築と、材料開発へのAIの本格導入である。

現在の材料開発の分野において、探索空間は人間の認知能力を超える高次元へと拡大しており、従来の経験や試行錯誤に頼る手法だけでは最適解に到達することが困難になっている。これに対応するためには、過去の成功データだけでなく、これまでは失敗と見なされて捨てられてきたデータもAI学習に有効活用し、探索戦略そのものを変革していく必要がある。文部科学省では、こうした材料データ基盤の整備を進めており、様々なデータを集約したプラットフォームの利活用を本格化させている。

今後の具体的な推進方策としては、サイバー空間とフィジカル空間を高度に接続し、実験、計算、データ基盤、そしてAIロボットシステムが一体となった新しい研究開発体制の構築を目指し、大

学、川上・川下産業、分析機器産業、スタートアップをつなぐハブ機能を整備した、共同利用型プラットフォームを形成する方針である。あわせて、資源リスクやサプライチェーンの課題に対しても、関係各省が一気通貫で施策を連動させ、戦略的に対応していく。

人材育成に関しては、国内の材料研究者約10万人を念頭に、年間3万人規模のAI人材育成体制を確立するという高い目標を掲げている。基礎的なリテラシーから自立レベルまで段階的なスキルセットを定義し、モデルカリキュラム、オンライン教材、さらには認定制度やオープンバッジの導入など、具体的な教育改革のロードマップが構想されている。

これからのAI時代においては、基礎研究、産業界、データ、そして人材を一体化させた「知のバリューチェーン」を築くことこそが、日本の資源制約を克服し、国際的な材料開発の主導権を握り続けるための重要な戦略となる。

総合討論

総合討論では、AIがサイエンスに浸透する時代における研究者の価値や人間にしかできない役割、日本の強みの活かし方について議論が交わされた。

AIは設定された範囲内の作業を高速化するのは得意だが、十分な学習データがない未開拓領域では限界がある。したがって本質的課題を見抜き、実験・装置設計そのものや、実験を深く理解した上

でクリエイティブな発想ができる人間の能力は、むしろ一層重要になるとの認識がはじめに共有された。

続いて、産学官連携については、大学の「ゼロからイチ」を生み出す基礎的成果を量産プロセスへ移行させる「谷間(橋渡し)」の領域にAI活用の余地があるとの意見が示された。その前提となるのが、データ基盤の整備である。日本には豊富なりアルデータが存在するものの、構造化されず分散している点が課題である。企業の機密情報を守りながら安心して使えるプラットフォームや、国によるデータの「図書館機能」の整備、メタデータの標準化が不可欠である。

最後に、今回の議論を単発で終わらせず、産学官が日常的に情報共有し、誰もが参加しやすい開かれた連携の場を持ち続ける重要性を確認して、討論は締めくくられた。

おわりに

本シンポジウムは、ハイブリッド形式での開催により、多くの方に参加いただいた。世話人は岡本と山本が務めた。運営にご協力いただいた分子化学研究所のスタッフの皆様にご心から感謝申し上げます。

〔岡本裕巳(日本学術会議第三部会員、化学委員会委員長、分子科学研究所名誉教授)、山本浩史(分子科学研究所 研究総主幹・協奏分子システム研究センター 教授)、守 誠一朗(日本化学会)〕

© 2026 The Chemical Society of Japan