

分子科学研究所所長招聘会議「AI for Chemical Sciences」

2026年6月11日（木）に、分子科学研究所所長招聘会議として、公開シンポジウム「AI for Chemical Sciences」が開催されました。本シンポジウムは、化学・分子科学分野における政策的課題や最先端の技術動向を議論する場として、分子科学研究所、日本化学会、日本学術会議の共催により2001年から継続して開催されているシリーズの一環です。第26回目となる今回は、世界的に大きな潮流となっている「AI for Science」を主題に、アカデミア、企業、行政のそれぞれの立場から、AIが化学・分子科学にもたらす変革と今後の課題について議論しました。

冒頭では、分子科学研究所で進められているスマートクラウドラボラトリープロジェクト「iLIS（アイリス：Integrated Smart Cloud Laboratory for Innovative Science）」が紹介されました。iLISは、文部科学省の「大規模集積研究システム形成先導プログラム」に採択された取り組みであり、フィジカルAIや自動化・遠隔化技術を活用して研究者を時間的・空間的制約から解放するとともに、AIが直接利用できる高品質な実験データを網羅的に取得・蓄積することを目指しています。特に、統一サンプルIDによって、電子状態、生命現象、材料特性などのデータを相互に接続し、マルチモーダルな解析を可能にする構想が示されました。続いて、日本学術会議化学委員会の活動について報告がありました。日本学術会議をめぐる制度改革が進む中でも、学問の自由と学術の自律性を確保しながら、化学委員会が中長期的な学術課題やAI連携を含む分野横断的な議論を

担っていることが紹介されました。

自律実験に関する講演では、AIが次に行うべき実験条件を提案し、ロボットが合成・測定を行い、その結果をAIが再学習するというサイクルが示されました。近年の化学研究では、単なる「自動化」にとどまらず、ベイズ最適化や大規模言語モデルを取り込んだ「自律化」へと進展しつつあります。その中で、日本が強みを持つ高品質な実験技術、装置構築能力、研究者の勘やコツを、AIとどのように接続するかが今後の国際競争力の鍵になるとの指摘がありました。また、化学、情報、ロボットを横断的に理解し、「どこを自動化し、どこを人間が担うのか」を設計できる人材育成の重要性も強調されました。

企業からは、日立製作所における生成AIやフィジカルAIの活用事例が紹介されました。製造やスケールアップのプロセスでは、今なお熟練者の暗黙知に依存する部分が大きく、特許や論文などの公知情報を自然言語処理によって解析し、プロセス設計やナレッジの可視化を支援する取り組みが進められています。また、生成AIが一見無関係に見えるキーワードや発想を提示し、人間の研究者と協働しながらアイデアの発散と収束を支援する「AI for Scientist」の可能性も示されました。

生命科学・創薬分野からは、創薬標的分子の探索AI、臨床ビッグデータを用いた治療標的探索、AlphaFoldによるタンパク質構造予測を活用したAI創薬について講演がありました。ゲノム情報、遺伝子発現データ、臨床データ、タンパク質立体構造情報を統合することで、従来は研究者の経験や仮説に大



きく依存していた創薬の最上流過程が、より網羅的かつ先入観の少ない探索へと変わりつつあります。既存薬の未知の標的を探索するドラッグ・リポジショニングや、遺伝子発現プロファイルから新規化合物構造を生成する研究など、AIによる創薬研究の新しい展開が具体例とともに紹介されました。

行政の立場からは、文部科学省・内閣府におけるマテリアル政策の動向が説明されました。製造・マテリアル分野は国家戦略技術領域の基盤として位置付けられており、政策的な取り組みが進められています。また、AIを有効に機能させるためには、従来重視されてきた成功データだけでなく、これまで捨てられてきた失敗データや飛び値のデータも含めて収集し、予測空間を広げる必要があることが強調されました。さらに、AI for Scienceの裾野を広げるファンディング、マテリアルAI駆動開発システムの構築、人材育成など、今後の政策展開についても紹介がありました。

総合討論では、AI時代における科学者の役割、データ標準化、人材育成と評価制度について活発な意見交換が行われました。AIやロボットが実験や解析の多くを担うようになって、「何を問うのか」「何をを目指すのか」という課題設定や、ゼロから新しい発想を生

み出す創発は人間の重要な役割である、という認識が共有されました。一方で、大学が得意とする基礎発見を企業での量産化・社会実装につなげるには、プロセス設計やスケールアップを支援するAIの活用、さらには産学協創やベンチャーの新たな枠組みが必要であるとの意見も出されました。また、AIを真に機能させるには、実験データそのものだけでなく、測定条件や実験手順を記述するメタデータの標準化が不可欠です。日本には優れた理化学機器メー

カーが多数存在しており、研究者コミュニティとメーカーが連携して、測定段階から高品質なメタデータが自動的に生成される仕組みを構築することが、日本主導の世界標準につながり得るとの議論がなされました。さらに、化学、情報、ロボット、装置開発を横断する若手研究者が挑戦しやすい環境を整えるため、論文数やインパクトファクターに偏りすぎない人事評価やファンディングのあり方も重要な課題として指摘

されました。

今回のシンポジウムを通じて、AI for Scienceは単なる研究効率化の道具ではなく、これまで人間だけでは探索できなかった巨大な科学空間に踏み込むための新しい研究環境であることが共有されました。日本の強みである高品質なフィジカルデータをサイバー空間のAIと結び付けることにより、化学・分子科学が今後の科学技術を牽引していくことが期待されます。

(山本 浩史 記)

受賞者の声

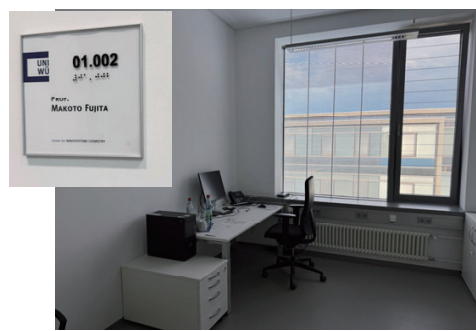
藤田誠卓越教授 フンボルト賞とヴェルツブルク滞在

ドイツのフンボルト財団は、日本の学振（JSPS）に相当する、同国の学術振興を担う政府系ファンディング機関です。私が今年3月にいただいた「フンボルト賞」は、ドイツが国外の研究者に授与する最高栄誉の賞に位置づけられています。本賞はドイツ人研究者との交流活性化を目的としており、受賞者には慣例として6ヶ月の滞在が求められます。そのため、多忙を極める日本の研究者は推薦を辞退されることも少なくないようです。私も過去に何度かお話をいただきつつも、まとまった海外滞在が難しく辞退を重ねてきました。しかし、東京大学での卓越教授就任に伴い、学科・専攻の運営や教育業務から解放されて時間的余裕ができたため、昨年、長年の友人であるヴェルツブルク大学のFrank Würthner教授からの推薦をお受けし、このたび受賞に至りました。懸念していた「6ヶ月滞在」の原則ですが、実際には多忙な受賞者の多くが計3ヶ月ほどの滞在

で免除されているとのこと、私も今年と来年に1.5ヶ月ずつ分割して滞する計画を立て、今年5～6月にかけて約1.5ヶ月のヴェルツブルク滞在を

実現しました。

推薦者であるWürthner教授は、超分子色素化学および機能性材料の超分子工学における国際的な第一人者であ



(左上) 3月にバンベルグで行われた授賞式。左から財団理事長、筆者、Würthner教授；(右上) ヴェルツブルク街の中心広場；(左下) CNC（白い建物）；(右下) CNC内にいただいたオフィス。