

生成AIによる材料開発のパラダイムシフトと国際エコシステム「AI Materials Foundry」の衝撃：三井化学の創設参画に見る化学産業の競争戦略

Gemini 3.6 Flash

緒言：マテリアルズ・インフォマティクスにおける生成AI革命と「AI Materials Foundry」の成立

先端産業におけるイノベーションのボトルネックは、回路設計や製品デザインそのものから、それを可能にする基礎材料の特性や物性限界へと移行している¹。半導体、クリーンエネルギー、二次電池、CO2捕獲・分離技術などの成長分野において、新材料の発見と実用化は産業競争力を左右する最大の要因である³。しかし、従来の実験と理論計算、そして研究者の知見に依存した試行錯誤的な材料開発手法では、初期構想から市場投入までに10年から20年という多大な時間とコストを要してきた⁵。

こうした開発期間の長大化という構造的課題に対し、人工知能(AI)を活用して物性予測や材料探索を行うマテリアルズ・インフォマティクス(MI)が普及してきたが、近年の生成AIおよび物理駆動型AIモデルの進化は、従来の予測型MIを超えた「逆問題解析(インバース・デザイン)」による材料自動創出の時代を切り拓いている⁵。

2026年7月28日、日本の大手化学メーカーである三井化学株式会社(本社：東京都中央区、代表取締役社長：市村 聡)は、生成AIを活用して新材料開発を加速する国際的なネットワーク「AI Materials Foundry」に、創設メンバーとして参画したことを発表した¹。同ネットワークは、英国ケンブリッジを拠点とする先端AIスタートアップのCuspAI社が主導し、AI技術、膨大な科学データ、計算資源、最先端の実験設備、ならびに世界的な専門知識を統合した画期的なグローバル協業プラットフォームである¹。

CuspAI社は2024年、化学者のチャド・エドワーズ(Chad Edwards)博士と、生成AIおよび機械学習の第一人者であるマックス・ウェリング(Max Welling)教授によって設立された⁴。同社は2026年7月、クライナー・パーキンス(Kleiner Perkins)やNEAが主導し、ベゾス・エクスペディショイ・パートナーズ(Bezos Expeditions)、AMDベンチャーズ、ルクス・キャピタル(Lux Capital)、英国政府系ファンド(Sovereign AI)などが参加するシリーズBラウンドにおいて4億5,000万ドルの資金調達を実施し、企業評価額は26億ドル、累計調達額は6億5,000万ドルを超えた⁸。さらに、同社の顧問ボードにはノーベル賞受賞者のジェフリー・ヒントン(Geoffrey Hinton)教授、ASMLの元社長兼CTOであるマルティン・ファン・デン・ブリック(Martin van den Brink)氏、ラムリサーチ取締役会長のアビ・タルウォーカー(Abhi Talwalkar)氏らが名を連ねており、学術的・産業的の両面で極めて高い評価を獲得している²。

本報告書では、三井化学が創設メンバーとして参画した「AI Materials Foundry」のエコシステム構

造、基幹プラットフォーム「MIRA」の技術的機構、三井化学の社内デジタルトランスフォーメーション(DX)との相乗効果を包括的に分析する。さらに、本取り組みが世界の化学・先端材料産業に及ぼす第二次・第三次の波及効果について深層的な考察を展開する。

「AI Materials Foundry」のエコシステム構造と参加エコシステムの全貌

「AI Materials Foundry」は、単一の企業や研究機関の枠組みを超え、材料開発のバリューチェーン全体を網羅する45以上の世界的先進企業および先端研究機関によって構成されている¹。従来、化学・材料メーカーが個社単独で進めてきたデータ収集とAIモデル構築には、学習データの多様性や計算資源の制約という限界が存在していた¹。本コンソーシアムは、ビッグテック、半導体装置・デバイス大手、材料メーカー、自動化ラボ、学術データ機関を結びつけることで、相互補完的な統合AIプラットフォームを形成している²。

エコシステムを構成する主要プレイヤーと役割分担

「AI Materials Foundry」を支える参画機関は、多角的な知見を統合するために明確な役割分担のもとで連携している²。

カテゴリー	主要参画企業・機関	ネットワーク内における主要役割・提供資源
中核AI・基盤提供	CuspAI, NVIDIA, Meta	AIプラットフォーム「MIRA」の提供、ハイパフォーマンス計算(HPC)基盤、原子レベルの基底モデル構築 ²
産業・材料メーカー	三井化学, ヘンケル, 3M, レゾナック, JSR, 富士フイルム, グッドイヤー, ジョンソン・マッセイ, ユミコア, メルク 等	ドメイン知識、実験データ、用途に応じた物性要件の提示、実証合成・評価 ¹
半導体・先端IT装置	東京エレクトロン, サムスン電子, アプライド・マテリアルズ, ラムリサーチ, キオクシア, AMD, ASMPT, ソフトバンク 等	次世代半導体・電子デバイス材料の性能要件定義、プロセス適合性の検証 ¹
自動化ラボ・研究機関	imec, A*STAR, AMOLF, DIFFER, デルフト工科大学(DTU), アムステルダム大学, ケンブリッジ大学, hte, VSParticle 等	高通量(ハイスループット)自動合成・評価装置、イン・シチュ(in situ)計測データ、実験検証 ²

構造・物性データ	CCDC, ICSD, Wiley	高精度な結晶構造データベース、文献・特許データ、学術知見の提供 ²
----------	-------------------	--

本エコシステムにおいて、NVIDIAは大規模言語モデルや結晶格子シミュレーションの計算基盤を提供し、Metaはオープンサイエンスに基づく原子スケールおよび分子物性の基本AIモデルを供給する⁸。これに対し、三井化学やレゾナック、ヘンケルなどの材料メーカーは、実際の製造プロセスや用途開発に必要な高品質な学習データとドメイン特有の知見を提供する¹。

さらに、東京エレクトロンやサムスン電子、アプライド・マテリアルズといった半導体関連企業が要件を直接入力し、imecやA*STARなどの先進研究機関がハイスループット実験装置を用いて生成された候補材料の迅速な物理検証を行う体制が整えられている²。

データ共有と知的財産の保護機構

化学産業において、分子構造や合成配合は企業の核心的な知的財産 (IP) であり、他社とのデータ共有には大きなハードルが存在してきた。しかし、「AI Materials Foundry」では、CuspAIの「MIRA」プラットフォームを中核とし、参画企業の機密データを直接露出させることなくモデルの学習と改善を可能にするフェデレーテッド・ラーニング (連合学習) やセキュリティ統合技術が適用されている³。各社は自社の独自データを安全に保護したまま、業界全体で共有された広範な知識ベースと大規模計算資源の恩恵を享受することが可能となる¹。

先端AI技術とシミュレーションの統合：MIRAがもたらす開発プロセスの一気通貫化

「AI Materials Foundry」の中核を担うCuspAIの独自のAIプラットフォーム「MIRA」は、研究者が提示する自然言語での要件や物性パラメータを受け取る入力インターフェースからスタートする¹。MIRAのAIエージェントは要求された物性を解釈すると、三次元結晶構造や分子骨格を自律創出する「逆問題生成モデル」を起動する²。続いて、生成された多数の候補構造に対して、機械学習原子間ポテンシャル (MLIP) や第一原理計算 (DFT) を組み合わせた「物理シミュレーション」が高速で適用され、熱力学的安定性や電子状態が瞬時に精査される⁵。

シミュレーションを通過した有望株は、ネットワーク内の自動化ラボ (imecやA*STAR等) へとデータ連携され、ハイスループット自動合成・計測装置によって物理的な実証実験が行われる²。この実証ステップで得られた合成成否や計測データは即座にMIRAへと回帰され、生成モデルおよびシミュレーションパラメータの精度を向上させる閉ループ (Closed-loop) 構造が確立されている⁵。

従来の順問題アプローチと生成AIによる逆問題アプローチの対比

従来の材料開発におけるコンピューショナル・アプローチは、既知の構造を入力して物性を計算する「順問題 (Forward Problem)」が主体であった⁵。これに対し、「MIRA」が採用する生成AIアプローチは、目的とする物性や用途パラメータ (例：特定の熱伝導率、光学屈折率、分解温度、誘電率など) を入力条件として直接与え、条件に合致する未知の分子構造や結晶格子をAIが直接創出する「逆問題 (Inverse Design)」を実現している²。

評価軸	従来の試行錯誤型実験	従来の予測型MI(順問題)	MIRA型生成AI(逆問題)
探索手法	研究者の直感と既存文献に基づく合成	データベース内候補の物性予測・スクリーニング	要求物性から未知の最適分子・構造を直接生成 ²
化学空間の範囲	既知の化合物群周辺の限定的範囲	既存データベースに登録された構造空間	数兆規模の未踏の化学・結晶空間(無機・有機) ⁴
開発周期(初期～検証)	数か月～数年/1テーマ	数週間～数か月/1テーマ	数分～数日(大規模シミュレーション上) ⁵
合成実現性の考慮	実験段階で研究者が判断	事後的な文献調査または実験による確認	プロセスと合成難易度を考慮した「Feasibility-First」生成 ¹²

MIRAを構成する要素技術と一貫通貫型の開発フロー

MIRAプラットフォームは、単なるテキスト生成AIではなく、物質科学に特化したマルチモーダルな機械学習アルゴリズムと物理モデルを組み合わせている⁸。

第一に、結晶・分子生成モデル(Crystal Diffusion Models & Generative Agents)である。拡散モデルやグラフニューラルネットワーク(GNN)を拡張し、三次元空間における原子配置や化学結合のエネルギー安定性を満たす分子・結晶構造を自律的に設計する⁵。

第二に、高速物理評価エンジン(Machine Learning Interatomic Potentials: MLIP & DFT)である。密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算は精度が高いものの計算コストが膨大であるという課題があったが、高精度な機械学習原子間ポテンシャル(MLIP)を併用することで、量子化学レベルの物性評価を従来比で数万倍の速度で実行する⁵。

第三に、**Feasibility-First**(合成容易性優先)スクリーニングである。理論上は安定していても現実には合成不可能な分子の生成を防ぐため、熱力学的安定性、短距離秩序(Short-Range Order)、欠陥挙動、前駆体の入手可能性や反応パスを同時評価し、実験室での再現性が高い候補に絞り込む¹²。

このメカニズムにより、研究開発の初期探索から候補材料の設計、物性評価、さらには提携する自動化ラボ(imec等)での実験検証までが大規模シミュレーション上で一貫通貫に自動化され、新材料創出の成功率が大幅に引き上げられる¹。

三井化学におけるAI/DX戦略の連続性と戦略的真意

三井化学が「AI Materials Foundry」に創設メンバーとして参画した背景には、同社が長年推進してきた研究開発分野におけるDX投資と、明確な全社的デジタル戦略の存在がある¹⁵。

三井化学のAI/MI取り組みの歩み

三井化学は、日本の化学産業の中でも研究開発（R&D）へのAI実装を早期から進めてきたパイオニアである¹⁵。2018年に「マテリアルズ・インフォマティクス推進室」を設立して以降、同社は社内の実験データと知見のデジタル化を推進してきた¹⁵。同社は2030年度までにDX関連投資として1,000億円を投入する経営コミットメントを掲げている¹⁵。

2026年3月には、「化学構造式から化合物情報を自律抽出する生成AIエージェント」を自社開発したことを発表した¹⁵。この技術は、マルチモーダルAIを活用して特許や論文中の画像情報（化学構造式）とテキスト情報を統合処理し、複雑な高分子や有機化合物の用途・物性・製造方法を自動特定するものである¹⁵。従来、1テーマあたり約1か月を要していた文献調査・構造解析作業を約1日へと80%以上短縮することに成功しており、今回の「AI Materials Foundry」参画は、社内基盤の強化からグローバルな共創基盤へと展開を加速させる戦略的ステップであると言える¹。

CTOコメントに見る構造的競争優位の構築

三井化学の表 利彦 CTO（常務執行役員）は、創設メンバーとしての参画に際し、この取り組みを先進的な国際ネットワークを通じた知見獲得にとどまらず、自社の競争優位性を構造的に強化する重要な機会と捉えている旨を表明している¹。同氏は、AI駆動による材料発見が研究開発のスピードと新規事業創出の成功率を大きく向上させ、具体的な事業価値をもたらすことへの期待を示すとともに、CuspAI、NVIDIA、Meta等との協業を通じて最先端技術を社内に取り込み、得られた知見を社内での競争力強化につなげていく姿勢を強調した¹。

この発言は、単なる外部技術のライセンス導入ではなく、世界の最先端エコシステムのプロトコル構築段階に直接介入することで、自社のコアマテリアル（半導体・ICT材料、バイオマス・サーキュラープラスチック、複合材料等）における事業化の成功率を構造的に向上させる狙いがあることを物語っている¹。

深層分析：化学産業における第二次・第三次インサイトと構造変革

三井化学の「AI Materials Foundry」参画と、CuspAIを中心とする国際共創プラットフォームの登場は、化学産業のビジネスモデルおよび競争原理に本質的な変革をもたらす。以下に、本事象から導き出される第二次および第三次の深層インサイトを提示する。

第二次インサイト：データ個社主義の限界と「プラットフォーム型ガバナンス」への転換

第1の第二次インサイトは、化学産業における「データ孤立主義（IPサイロ）」の崩壊と、オープン・クローズド戦略を融合させたプラットフォーム型ガバナンスへの移行である¹。

従来、大手化学メーカーは自社の実験データや合成ノウハウを厳重に秘匿し、個社独自のMIモデルを構築することで競争優位を維持しようとしてきた。しかし、生成AIやファンデーションモデル（基礎モデル）のパラメータ規模が巨大化し、必要とされる事前学習データ量が天文学的に増大する中で、一化学メーカーが単独で保持するデータのみで世界基準の生成AIモデルを開発することは不可能な領域に達している¹。

「AI Materials Foundry」の構造は、基礎となる物理・原子モデル（Meta提供）および超並列計算基盤（NVIDIA提供）を非競争領域として共通化し、その上でCuspAIのMIRAを介して各社がデータを安全

に持ち寄る形式をとっている²。これにより、「基礎的な分子生成モデルは協調領域」、「アプリケーションや最終配合・用途開拓は競争領域」という二重構造が明確化された。個社単独でのAI投資に執着する企業は、モデルの精度と探索能力において国際コンソーシアム勢に対して致命的な後塵を拝するリスクがある。

第2の第二次インサイトは、「サイバー・フィジカル融合 (Cyber-Physical Convergence)」による実験室の自動化とフィードバックループの高速化である⁵。

どれほど優れた生成AIであっても、AIが提案した候補分子が実際に合成可能であり、計算通りの性能を発揮するかどうかは実証実験に依存する⁸。FoundryにimecやA*STAR、hteなどの自動化合成・評価プラットフォームが参画している点は極めて重要である²。AIシミュレーション(サイバー空間)と自動化ラボ(フィジカル空間)が密結合されることで、合成失敗のデータ(ネガティブデータ)がリアルタイムでAIモデルに再学習され、モデルの精度が幾何級数的に向上する自己学習ループ(閉ループ最適化)が完成する⁵。

第三次インサイト: バリューチェーンの逆転とサプライチェーンの地政学的再編

第1の第三次インサイトは、化学・材料産業におけるバリューチェーンの「プロダクトアウト型 (Supply-Push)」から「要求駆動オンデマンド型 (Demand-Pull)」への完全な逆転である²。

従来の化学メーカーの事業モデルは、「自社技術で新規化合物を合成し、その物性に適合する用途や顧客を後から探索・提案する(プロダクトアウト)」という流れが主流であった。しかし、MIRAのような生成AIプラットフォームが定着すると、半導体メーカー(サムスン等)や電子機器メーカー、自動車メーカー(現代自動車等)などの「需要側」が求める物性・スペック条件をAIに入力し、AIが直接最適な分子構造と合成パスを逆算設計する時代となる¹。

この変化により、製品開発の初期段階における主導権は、従来の素材メーカーから「プロンプトや物性要件を定義できるシステムインテグレーターやエンドユーザー」、あるいは「最先端の生成AIプラットフォームを牛耳るプレイヤー」へと移行する可能性がある。三井化学が創設メンバーとして参画した真の理由は、このバリューチェーンの逆転局面において自社が「単なる受託製造業者」へと格下げされることを防ぎ、AIエコシステムの最上流で需要要件の策定に関与し続けるためであると解釈できる¹。

第2の第三次インサイトは、環境規制および地政学的サプライチェーンリスクに対する「材料代替の即応性」の確立である³。

PFAS(有機フッ素化合物)に対する世界的な規制強化や、特定国への稀少資源(レアアース、特定の貴金属触媒等)の依存は、グローバル製造業における最大級の地政学的リスクとなっている。AI駆動型の逆問題解析を用いれば、「特定元素(例:コバルトやイリジウム)を一切使用せずに同等の触媒能力を持つ有機分子」や「PFAS代替となる環境適合型高分子」を数週間から数か月で設計・検証することが可能となる⁴。

「AI Materials Foundry」のような国際共創プラットフォームは、気候変動対策(CO2捕獲材料や次世代電池)だけでなく、地政学的リスク発生時におけるサプライチェーン代替材料の迅速な創出という「経済安全保障上の安全弁」としての機能を果たすことが期待される³。

結論と今後の展望

三井化学による国際ネットワーク「AI Materials Foundry」への創設メンバー参画は、単なる一企業のデジタル化推進の枠組みを超え、世界の材料科学と化学産業が新たなフェーズに突入したことを示す象徴的な出来事である¹。

1. 技術的成熟度の到達: 生成AIと分子シミュレーション、さらには物理駆動型AIモデル(GNN、MLIP)の融合により、材料開発は「順問題スクリーニング」から「逆問題オンデマンド創出」へと移行した⁵。
2. エコシステムの必然性: 計算資源の巨大化と学習データの多様化に伴い、個社単独でのAI開発には限界が訪れており、CuspAI、NVIDIA、Meta、先端機器メーカー、材料メーカー、自動化ラボが結集した国際オープン・プラットフォームが今後のデファクトスタンダードとなる¹。
3. 事業優位性の再定義: 今後の化学メーカーの競争力は、「過去に蓄積した秘匿ノウハウの量」ではなく、「最先端AIエコシステムを活用して需要側の物性要件をいかに素早く構造化し、実験検証を経て製品化できるかというプロセス統合能力」によって決定される¹。

三井化学は、社内のAIエージェント開発(2026年3月の文献調査自動化等)で培った技術的素地と、今回のFoundry参画による最先端アルゴリズム・計算資源の導入を高度に噛み合わせることで、半導体材料やサステナブル素材分野におけるグローバルな競争優位性を構造的に強化していくと見込まれる¹。

化学産業全体においても、「AI Materials Foundry」のような取り組みが今後の新材料創出の標準的インフラとなり、研究開発期間を数年から数か月へと短縮することで、持続可能な社会の実現と先端技術の進化を急速に加速させることが確実視されている⁴。

引用文献

1. 【三井化学】「AI Materials Foundry」創設メンバーとして参画-生成AIで新材料開発を加速へ, <https://www.yakuji.co.jp/entry137208.html>
2. 三井化学、生成AIで新材料開発を加速する「AI Materials Foundry」に創設メンバーとして参画, https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2026/2026_0728/index.htm
3. CuspAI、グローバルAIマテリアルファウンドリーを立ち上げました - ITBusinessToday, <https://itbusinessToday.com/ja/industrial-tech/science/cuspai-launches-global-ai-materials-foundry/>
4. マテリアルズAIのCuspAI、新素材探索を加速する国際ネットワーク「AI Materials Foundry」を始動, <https://atpartners.co.jp/news/2026-07-21-materials-ai-s-cuspai-launches-ai-materials-foundry-an-international-network-to-accelerate-the-discovery-of-new-materials>
5. AI-Accelerated Materials Discovery in 2026: How Generative Models, Graph Neural Networks, and Autonomous Labs Are Transforming R&D - Cypris, https://www.cypris.ai/insights/ai-accelerated-materials-discovery-in-2025-how-generative-models-graph-neural-networks-and-autonomous-labs-are-transforming-r-d?fa052d8a_page=72
6. LLM-driven materials knowledge extraction: multimodal parsing, ontology, and agentic systems - OAE Publishing Inc., <https://www.oaepublish.com/articles/jmi.2026.38?to=comment>
7. Perspective: Towards sustainable exploration of chemical spaces with machine learning, <https://arxiv.org/html/2604.00069v1>
8. 新材料をAIで探索するCuspAI、4億5,000万ドル調達 東京エレクトロンなど45社超と材料開発網構築 - アドバンスドテクノロジーX株式会社, <https://www.atx-research.co.jp/contents/launching-our-ai-materials-foundry-and>

[-450-million-series-b](#)

9. CuspAI | AI-powered materials discovery, <https://cusp.ai/>
10. Launching our 'AI Materials Foundry' — and \$450 million Series B | by CuspAI - Medium, <https://medium.com/@CuspAI/launching-our-ai-materials-foundry-and-450-million-series-b-f5603d8259dd>
11. From Data to Discovery: Challenges and Solutions in AI-Driven Materials Science - JPS Journals, <https://journals.jps.jp/doi/pdf/10.7566/JPSJ.95.042001>
12. Generative and multimodal AI for materials prediction and design: Progress, challenges, and perspectives - arXiv, <https://arxiv.org/html/2607.21660v1>
13. Generative and multimodal AI for materials prediction and design: Progress, challenges, and perspectives - arXiv, <https://arxiv.org/pdf/2607.21660>
14. Atomistic Modeling of Chemical Disorder in Materials: Bridging Classical Methods and AI-Assisted Approaches - arXiv, <https://arxiv.org/html/2605.19124v1>
15. 三井化学の R&D における生成 AI 活用の全体像 - よろず知財戦略コンサルティング, <https://yorozuipsc.com/uploads/1/3/2/5/132566344/299c66c25a8128d68f31.pdf>
16. ニュースリリース - 2026 - 三井化学 - Mitsui Chemicals, <https://jp.mitsuichechemicals.com/jp/release/2026/index.htm>
17. 三井化学、生成AIで新材料開発を加速する「AI Materials Foundry」に創設メンバーとして参画, <https://www.atpress.ne.jp/news/618026>
18. 三井化学 生成AIで新材料開発を加速する「AI Materials Foundry」に創設メンバーとして参画, <https://chemical-news.com/2026/07/29/%E4%B8%89%E4%BA%95%E5%8C%96%E5%AD%A6%E3%80%80%E7%94%9F%E6%88%90ai%E3%81%A7%E6%96%B0%E6%9D%90%E6%96%99%E9%96%8B%E7%99%BA%E3%82%92%E5%8A%A0%E9%80%9F%E3%81%99%E3%82%8B%E3%80%8Cai-materials-foundry/>