

NIMS と IBM、生成 AI を活用した次世代材料研究基盤の構築に向けた協業に合意

— NIMS の材料データ基盤と IBM の AI・先端コンピューティング技術を連携し、材料科学の基盤構築を目指す —

国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）と IBM は、NIMS が蓄積してきた材料データおよび研究基盤と、IBM の AI・量子コンピューティング技術を組み合わせ、材料科学分野における AI 活用基盤の構築を目指す協業に向けた覚書（本 MOU）を締結しました。本 MOU は、材料研究に関する将来的な技術検討や共同研究開発について、両者が長期的な観点から議論を進めることを意図するものです。



（左から）平野 敦大（日本 IBM 事業開発&ストラテジックアライアンス）、工藤 道治（日本 IBM 東京基礎研究所 担当マネージャー）、武田 征士（日本 IBM 東京基礎研究所 主席研究員）、福田 剛志（日本 IBM 執行役員 研究開発担当 兼 東京基礎研究所所長）、宝野 和博（国立研究開発法人 物質・材料研究機構 理事長）、竹内 正之（国立研究開発法人 物質・材料研究機構 理事）、出村 雅彦（国立研究開発法人 物質・材料研究機構 技術開発・共用部門 部門長）、三橋 朗（日本 IBM 事業開発&ストラテジックアライアンス）

■ 技術背景

材料科学分野では、研究データの複雑化にともない、AI や量子計算による研究開発の加速が期待されています。こうした先進コンピューティング技術と NIMS に収集・蓄積される材料基盤データを活用することで、材料データの統合、研究プロセスの効率化、新規材料の発見・開発・実用化までの高速化を実現する新たな基盤技術の構築が求められています。

■ 検討する主要領域

NIMSとIBMは、本MOUに基づき、以下の技術領域におけるパートナーシップを進めていきます。

- 基盤モデル、LLM（大規模言語モデル）^{*1}、エージェント技術^{*2}を含む先進 AI 技術および数理アルゴリズムの材料分野

への応用展開

- 材料研究への量子コンピューティング応用可能性の探索
- データ統合およびインフラ整備を通じた材料科学研究基盤の構築

これらの協議内容に基づき、本パートナーシップにおける具体的なプロジェクトの構想策定を実施します。

■ NIMS の取り組み

NIMS は材料データ中核拠点（MDPF）を設置し、世界有数の大規模データ基盤（例：PoLyInfo、AtomWork-Adv、Kinzo、RDE、など）を開発し、提供しています。加えて、自動自律実験等において世界を先導する取り組みを加速させています。同時に世界屈指の材料研究者を擁する材料専門の研究所として材料成果を創出するとともに、国内外のアカデミア、産業界との共同研究、研究基盤の提供を通して、材料分野のイノベーション創出に貢献しています。NIMS が有する材料データ群および自動自律実験、先端設備は、AI および量子技術を活用した新規材料探索に向けた高度な研究開発を遂行する上で貴重な基盤となっています。IBM の先進コンピューティングと融合することで、AI for Materials^{*3} 実現に向けた取り組みを加速することが期待されます。

■ IBM の取り組み

IBM は、基礎研究部門の IBM Research によるマテリアル・ディスカバリー技術を中核とするデジタルトランスフォーメーション・サービス「IBM Material DX」を 2025 年に発表し、先端テクノロジーによる材料研究開発の加速に貢献しています。IBM と NIMS は、材料科学、AI、量子コンピューティングそれぞれの強みを融合させることで、材料研究分野における技術革新を推進する可能性を検討します。さらに、これまで IBM が長年にわたり築いてきた研究パートナーシップを基盤として、日本を代表する AI および量子アルゴリズム分野の研究グループとの連携をさらに拡大する方策についても検討します。

■ 今後の方針

両者は、本協議を通じて、材料研究開発における基盤技術の構築ならびに新たな価値創出に資する機会を追求していきます。

*1:LLM（大規模言語モデル）は、大量のデータを学習し、文章の生成や理解を行う AI 技術です。

*2:エージェントは、目的に応じて自律的に判断し、複数の処理やツールを連携して実行する AI 技術です。

*3: AI・データ・自動自律実験を融合し、革新的材料を創出する新しい研究開発基盤です。

<報道関係者のお問い合わせ先>

NIMS 国際・広報部門 広報室

TEL: 029-859-2026 / E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp

日本アイ・ビー・エム株式会社 広報 川上

広報代表 TEL: 03-3808-5120/ E-mail: PRESSREL@jp.ibm.com