

# マテリアルインフォマティクス

今週のキーワード

## Weekly Intelligence Report

## AI材料発見

2026-06-19 | 49件 | 7カ国

自律ラボと量子計算が加速

troy-technical.jp

49

件  
総記事数

7

カ国  
対象国数

1200

種  
合金生成数

1ms未満

半導体解析

### 今週の全49記事 — 5軸評価で読むべき記事を選ぶ

各列の見方 — 技術新規性: ブレークスルー度合い 実用化距離: 製品として使える近さ 市場インパクト: 業界全体への影響規模  
データ信頼性: 定量データ・査読の有無 日本関連度: 日本の企業・サプライチェーンとの直接的関連性

#	記事タイトル	種別	技術 新規性	実用化 距離	市場 インパクト	データ 信頼性	日本 関連度	一行サマリ
#01	有機半導体AI加速	学術論文	●●●●○ ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●○ ○	●●●○○ ○	AIと生成モデルが有機半導体の逆設計とハイスループットスクリーニングを加速し、開発時間とコストを大幅削減。
#02	AIで水素原子特定	技術報告	●●●●○ ●	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●○ ○	●●●○○ ○	スイスPSIがX線回折で困難だった結晶構造中の水素原子位置をAIで正確特定、材料シミュレーション精度を向上。
#03	IBM、量子誤り訂正	企業発表	●●●●○ ●	●○○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●○ ○	●●●○○ ○	IBMがLLMと進化的フレームワークで465種の新規量子誤り訂正コード候補を発見、量子計算の堅牢化に貢献。
#04	AIで反強磁性体発見	技術報告	●●●●○ ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●○○ ○	●●●○○ ○	結晶対称性を活用したAIモデルSG-CDVAEがスピントロニクス向けに4つの安定な新規反強磁性体を特定。
#05	AIで材料選択革新	企業ブログ	●●●○○ ○	●●●○○ ○	●●●○○ ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	Leo AIが機械設計における材料選択をAIで革新、多目的最適化により最適な高性能材料を効率的に特定。
#06	ロボットハンド逆設計	学術論文	●●●●○ ○	●○○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●○ ●	●●●○○ ○	データ駆動型逆設計フレームワークにより、人間レベルの動的性能を持つロボットハンドが実現。
#07	ChemCopilot分子設計	企業ブログ	●●●●○ ○	●●●○○ ○	●●●○○ ○	●○○○○ ○	●●●○○ ○	ChemCopilotの生成AIが自然言語プロンプトで新規分子を瞬時にSMILES生成、分子設計を自動化。
#08	生成AI教育育成	業界レポート	●○○○○ ○	●●●●○ ●	●○○○○ ○	●●●○○ ○	●●○○○ ○	アメリカの教育機関が生成AIの教育育成に関する10のベストプラクティスを公開、教育現場でのAI活用を促進。
#09	LLM自律エージェント	学術論文	●●●●○ ●	●○○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●○ ●	●●●○○ ○	LLMベースの自律エージェントPhyNexが計算物理学で半導体誘電スペクトル予測などを自動発見。
#10	AIで光学部品逆設計	技術報告	●●●●○ ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●○ ○	●●●○○ ○	スウェーデン研究者がAIと物理計算を融合したQNM-Netで光学部品の逆設計を高速化、量子コンピューティングへ貢献。
#11	InvDesMobility材料探索	学術論文	●●●●○ ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●○ ●	●●●○○ ○	InvDesMobilityフレームワークがキャリア移動度に基づく信頼性ゲート付き第一原理フィードバックで材料探索を効率化。
#12	AI/HPC統合研究	国立研究所発表	●●●●○ ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●○ ○	●●●○○ ○	アルゴン国立研究所がISCでAIとHPC、量子コンピューティング統合による材料・分子発見加速研究を発表。
#13	腐食科学ワールドモデル	学術論文	●●●●○ ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●○○ ○	●●●○○ ○	DeepMindの生成AIモデルが腐食科学のワールドモデル構築を推進、耐食性材料設計に新たな道。
#14	科学生成言語LOGOS	学術論文	●●●●○ ●	●○○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●○ ●	●●●○○ ○	科学生成言語モデルLOGOSが自然科学の異種タスクを単一フレームワークで統合し高精度を達成。

#	記事タイトル	種別	技術 新規性	実用化 距離	市場 インパクト	データ 信頼性	日本 関連度	一行サマリ
#15	MLで錯体構造予測	学術論文	●●●●○ ○	●●○○○ ○	●●○○○ ○	●●●●● ●	●●○○○ ○	ACS論文がオスマベンゼン錯体の構造特性予測に化学情報駆動型MLフレームワークを導入し高精度を実現。
#16	材料科学AI特集	業界レポート	●●○○○ ○	●●●●● ●	●●●○○ ○	●●●○○ ○	●●●○○ ○	Tech Science Press誌がAI・ML・生成モデルによる材料科学のパラダイム進化を特集、最新知見を提供。
#17	XRDiff結晶構造予測	学術論文	●●●●● ○	●●○○○ ○	●●●●● ○	●●●●● ●	●●●●● ○	XRDiffが拡散モデルを活用し粉末X線回折データから結晶構造を予測、新材料開発の構造決定を高速化。
#18	PhononBench安定性	学術論文	●●●●● ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●● ●	●●●○○ ○	PhononBenchがAI結晶生成モデルの動的安定性を評価する大規模ベンチマークを公開、実用性向上へ。
#19	金属中間相発見	技術報告	●●●●● ●	●○○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●● ○	●●○○○ ○	ブラウン大学らが金属の未発見中間相物質を安定化させ、量子コンピューティングへ新たな洞察を提供。
#20	製薬ML分子設計	学術論文	●●●○○ ○	●●○○○ ○	●●●●● ○	●●●●● ●	●●●●● ○	MDPIレビューが製薬化学におけるML駆動型分子設計と構造-特性-性能関係の統合フレームワークを提唱。
#21	DP-EVAでMLIPs開発	学術論文	●●●●● ○	●●○○○ ○	●●●●● ○	●●●●● ●	●●●●● ○	DP-EVAフレームワークが大規模原子モデルの事前学習済み知識を最大化し、データ効率の高いMLIPsを開発。
#22	MLIPsドメイン適応	学術論文	●●●●● ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●● ●	●●●○○ ○	スパース性促進ファインチューニングが事前学習済み等価材料基盤モデルのドメイン適応性を強化。
#23	MLIPs電荷状態埋込	学術論文	●●●●● ○	●●○○○ ○	●●●●● ○	●●●●● ●	●●●●● ○	MLIPsの電子エントロピー課題を電荷状態埋込め込みで解決、バッテリー材料予測精度を向上。
#24	2D材料粗視化ポテンシャル	学術論文	●●●●● ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●● ●	●●●○○ ○	多層hBNの機械学習粗視化ポテンシャルにVirial-Matchingを導入し、2D材料のメソスケール問題を解決。
#25	液状U,Zr予測	学術論文	●●●●● ○	●●○○○ ○	●●○○○ ○	●●●●● ●	●●○○○ ○	液状(U,Zr)の熱物理・構造予測で機械学習SNAPがMEAMを上回り、粘度異常などを解明。
#26	AI触媒発見最前線	業界レポート	●●●●● ○	●●●○○ ○	●●●●● ○	●●●○○ ○	●●●●● ○	Chemistry World誌がAIエージェントとMLIPsによる触媒発見加速の最前線を報じ、開発効率を劇的に改善。
#27	制約なしMLIPs	学術論文	●●●●● ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●● ●	●●●○○ ○	大規模データセットにスケールアップされた制約なしMLIPsが静的シミュレーションで既存モデルを凌駕。
#28	UMLFFsベンチマーク	学術論文	●●●○○ ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●● ●	●●●○○ ○	UniFFBenchが汎用機械学習力場UMLFFsを実験測定値と照合し、材料シミュレーションの安定性などを評価。
#29	物理法則組み込みAI	技術報告	●●●●● ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●● ○	●●●○○ ○	スウェーデン・チャルマース工科大学が物理法則組み込みAIで量子コンピューティング向け光学部品開発効率を向上。
#30	電子密度生成AI	学術論文	●●●●● ○	●○○○○ ○	●●●○○ ○	●●●○○ ○	●●●○○ ○	Hugging Faceが3D畳み込みオートエンコーダと潜在拡散モデルを組み合わせた電子密度生成フレームワークを公開。
#31	量子ビット削減	技術報告	●●●●● ●	●○○○○ ○	●●●○○ ○	●●●●● ○	●●●○○ ○	量子コンピューティングが結晶材料シミュレーションに必要な量子ビット数を4~8個削減する新フレームワーク発表。
#32	セルフドライビングラボ	業界レポート	●●●○○ ○	●●●●● ○	●●●●● ●	●●●○○ ○	●●●●● ●	世界経済フォーラムがAIとセルフドライビングラボで材料発見を数年から数ヶ月に短縮する新戦略を提言。
#33	AI量子材料シミュ	大学発表	●●●●● ●	●○○○○ ○	●●●●● ○	●●●●● ○	●●●○○ ○	ワシントン大学がAIと量子コンピューティングで量子材料シミュレーションを大規模化、新現象を発見。
#34	AI・ロボティクス統合	学術論文	●●●●● ○	●●○○○ ○	●●●●● ○	●●●●● ●	●●●●● ○	計算材料科学がAI・ロボティクス統合で材料探索のリスク低減とメカニズム解明へ進化。
#35	解釈可能なAI開発	大学発表	●●●●● ○	●●○○○ ○	●●●○○ ○	●●●○○ ○	●●●●● ●	東京科学大学・東北大学がAIの予測根拠を可視化する「解釈可能なAI」手法を開発、材料設計を加速。
#36	CuspAIに4億ドル出資	企業発表	●●●●● ○	●●●●● ○	●●●●● ●	●●●○○ ○	●●●●● ○	ジェフ・バズス氏がAI材料科学CuspAIに4億ドル出資、炭素回収・半導体材料開発を加速。
#37	LLM科学発見応用	学術論文	●●●●● ○	●○○○○ ○	●●●●● ○	●●●○○ ○	●●●○○ ○	Hugging FaceがLLMの科学的発見応用プレプリントを紹介、材料・生物・化学分野での自律エージェントの可能性強調。

#	記事タイトル	種別	技術 新規性	実用化 距離	市場 インパクト	データ 信頼性	日本 関連度	一行サマリ
#38	デジタル材料エコシステム	学術論文	●●●●○	●●○○○	●●●●○	●●●●●	●●●●○	RSC論文が「デジタル材料エコシステム」を提唱、データベースとAIエージェントで材料発見を自律化。
#39	Radical AI自律ラボ	企業発表	●●●●●	●●●○○	●●●●●	●●●○○	●●●●●	Radical AIが「セルフドライビングラボ」で6ヶ月に1,200種の合金を生成、材料発見を劇的に加速。
#40	SandboxAQ資金獲得	企業発表	●●●○○	●●●●○	●●●●●	●●●○○	●●●●●	SandboxAQがCHIPS法に基づき米国商務省から5億ドル獲得、半導体材料サプライチェーン課題解決へ。
#41	AWS/QuEra量子計算	企業発表	●●●●○	●●●○○	●●●●●	●●●●○	●●●○○	AWSとQuEraが2028年までにMegaquop規模「Libra」をAmazon Braketに導入、フォールトトレラント量子計算実現へ。
#42	制約なしMLIPs強化	学術論文	●●●●○	●●○○○	●●●○○	●●●●●	●●●○○	ResearchGate論文が制約なしMLIPsが大規模データセットで優れた精度と速度を達成、静的シミュレーションを強化。
#43	AlGaN熱輸送予測	学術論文	●●●●○	●●○○○	●●●●○	●●●●●	●●●●○	MDPI論文が機械学習MTPsを開発、AlGaNおよび関連材料の熱輸送特性を低コストで高精度予測。
#44	九大AEM材料開発	大学発表	●●●●○	●●○○○	●●●●○	●●●○○	●●●●●	九州大学が説明可能なAI・ChatGPT・専門知識を融合した「ヒューマン・イン・ザ・ループ」フレームワークでAEM材料開発を効率化。
#45	ASCEND触媒発見	プロジェクト発表	●●●●○	●●○○○	●●●●○	●●●○○	●●●●○	ベルリンのASCENDプロジェクトが3,000万ユーロ獲得、AI主導の閉ループシステムで触媒発見を革新。
#46	半導体逆問題解決	大学発表	●●●●●	●●○○○	●●●●○	●●●○○	●●●●●	東京科学大学が半導体解析の逆問題を1ミリ秒未満で解決するタンデムニューラルネットワークを開発。
#47	AtomGPTエージェントAI	学術論文	●●●●○	●●○○○	●●●○○	●●●●○	●●●○○	AtomGPT.orgがオープンアクセス型エージェントAIプラットフォーム「AGAPI-Agents」を発表、材料設計を加速。
#48	MIポストドク募集	求人情報	●○○○○	●●●●○	●○○○○	●●○○○	●●○○○	パデュー大学が計算材料設計およびマテリアルズインフォマティクス分野でポストドク研究員を募集、DFT・MLIPs研究を強化。
#49	AI駆動ポリマー研究	大学発表	●●●●○	●●○○○	●●●●○	●●●○○	●●●●○	SchubertグループがAI4X会議でAI駆動型ポリマー研究を発表、高スループット実験とMLで材料発見を加速。

●●●●○ High ●●●○○ Med-High ●●○○○ Med ●○○○○ Low | 背景黄色 = 注目記事

## 今週、判断に影響しうる3つの問い

### ① 自社の材料開発は「セルフドライビングラボ」の波に乗れているか？

Radical AIが6ヶ月で1,200種の合金を生成し、世界経済フォーラムもAIと自動化ラボによる材料発見の加速を提言。従来の試行錯誤型開発では、この速度に追いつけません。貴社の研究開発体制は、このパラダイムシフトに対応できていますか？

### ② AIが導き出す「解釈」を、自社の技術者は活用できるか？

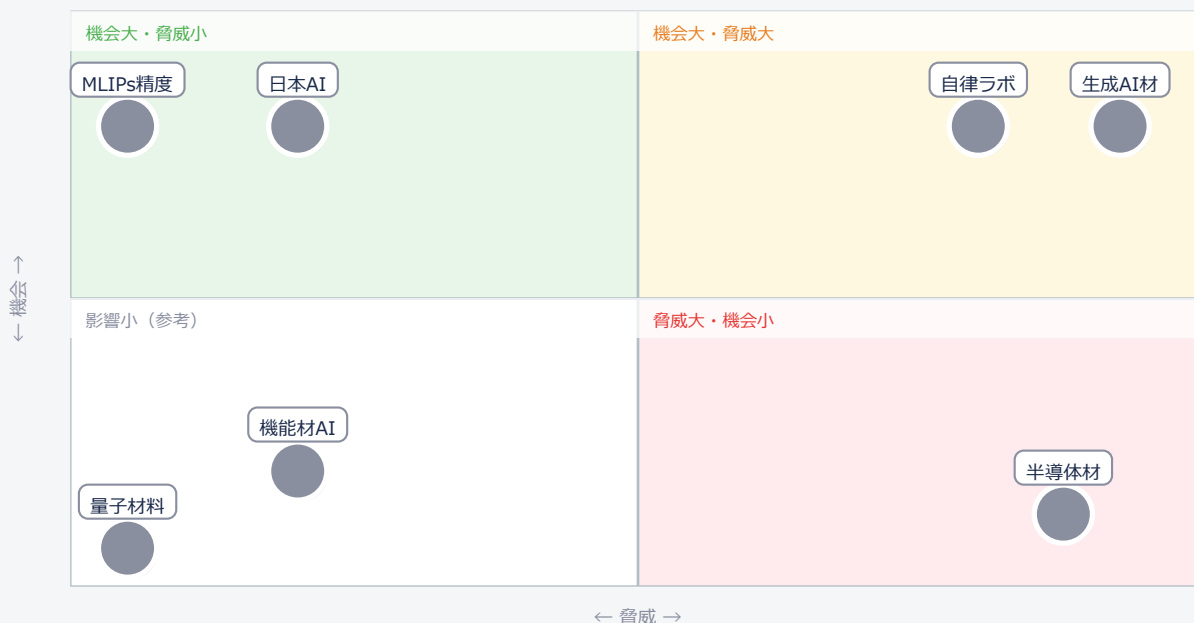
東京科学大学・東北大学、九州大学の研究は、AIの予測根拠を可視化する「解釈可能なAI」の重要性を示しています。AIが「なぜ」その材料を推奨するのかを理解し、それを次の設計に活かすための技術者育成とシステム構築は進んでいますか？

### ③ 量子コンピューティングは、自社の材料設計をいつ変革し始めるか？

AWSとQuEraは2028年までにMegaquop規模の量子デバイス導入を計画し、量子ビット削減技術も進展。まだ基礎研究段階ですが、数年後には材料シミュレーションに大きな影響を与える可能性があります。貴社は量子技術の動向を注視し、将来の材料設計への影響を評価していますか？

## 日本企業にとっての「機会 vs 脅威」

日本企業にとっての「機会 vs 脅威」マトリクス



項目	象限	↑ 機会	↓ 脅威
● MLIPs精度	機会大	シミュ精度向上	—
● 日本AI	機会大	国内技術活用	—
● 自律ラボ	注意	材料開発を劇的加速	開発競争激化、後れ
● 生成AI材	注意	新材料設計効率化	海外技術依存、競争
● 半導体材	脅威大	協業で市場参入	米国優位、調達難
● 量子材料	参考	新材料発見加速	技術習得、投資負担
● 機能材AI	参考	開発効率向上	—

## 深掘り ① — Radical AIが示す「自律ラボ」の衝撃

#39 | 2026/06/17 | Latent.Space | 技術新規性●●●●● 実用化距離●●●○○ 市場インパクト●●●●●  
データ信頼性●●●○○ 日本関連度●●●●●

Radical AIは、AIとロボティクスを統合した「セルフドライビングラボ」により、わずか6ヶ月で1,200種類の合金を生成し、うち300種類が新規材料であったと発表しました。これは、AIが仮説生成から物理的合成、高スループット特性評価、そしてクローズドループ学習までを自律的に実行する画期的なシステムです。

従来の材料開発サイクルを数百倍に加速する可能性を秘めており、人間による試行錯誤の限界を突破します。この技術は、エネルギー、エレクトロニクス、航空宇宙など、あらゆる産業の新材料開発に革命をもたらすでしょう。

### ▶ 技術者の視点

Radical AIの成果は、材料開発のパラダイムが「AI駆動型自律ラボ」へと移行していることを明確に示しています。6ヶ月で1,200種という数字は驚異的で、従来の開発手法では考えられない速度です。ただし、生成された新規合金300種の具体的な特性や実用性はまだ不明であり、商業化にはさらなる検証が必要です。日本企業にとっては、【機会】として、この技術を取り入れることで開発競争力を劇的に向上させられる可能性があります。一方で、【脅威】としては、この流れに乗り遅れると、海外勢に大きくリードを許すこととなります。特に、材料・素材メーカーは、自社R&D;にAIとロボティクスを統合するロードマップを「即時」に策定し、パイロット導入を「短期」で開始すべきです。経営企画部門は、海外のAI材料スタートアップとの連携やM&A;も視野に入れるべきでしょう。

## 深掘り ② — 世界経済フォーラムが提言する材料DX戦略

#32 | 2026/06/11 | The World Economic Forum | 技術新規性●●●○○ 実用化距離●●●●● 市場インパクト●●●●●  
データ信頼性●●●○○ 日本関連度●●●●●

世界経済フォーラムは、気候変動対策の鍵となる材料イノベーションを加速するため、AIと自動化された実験を統合した「クローズドループ学習システム」や「セルフドライビングラボ」の導入を提言しました。これにより、材料発見にかかる期間を数年から数ヶ月へと劇的に短縮できると強調しています。

この戦略は、設計、実験、データ分析のサイクルを連続的に統合することで、より効率的かつ持続可能な研究開発を実現することを目指します。特に、CO2排出削減、再生可能エネルギー効率化、持続可能な材料開発といった地球規模の課題解決に貢献する新素材の創出が期待されます。

### ▶ 技術者の視点

世界経済フォーラムの提言は、AIと自動化が材料開発の国際競争力に直結する戦略的要素であることを示唆しています。特に「数年から数ヶ月」という開発期間短縮の目標は、日本の製造業が直面するグローバル競争において極めて重要な指標です。この提言は、単なる技術論ではなく、国家戦略レベルでの材料DXの必要性を訴えています。日本企業にとっては、【機会】として、この戦略に沿ってR&D;投資を加速すれば、新たな市場を創造し、国際的なリーダーシップを確立できる可能性があります。しかし、【脅威】としては、この提言が示す方向性への対応が遅れば、国際競争から取り残されるリスクがあります。経営企画部門は、この提言を深く分析し、自社の材料開発戦略にどう組み込むかを「即時」に検討すべきです。R&D;部門は、AIとロボティクスを組み合わせた「マテリアルズ・ファクトリー」構想の具体化を「短期」で進める必要があります。

## 深掘り ③ — 東科大、半導体解析の「逆問題」をミリ秒で解決

#46 | 2026/06/18 | 東京科学大学 | 技術新規性●●●●● 実用化距離●●○○○ 市場インパクト●●●●○  
データ信頼性●●●○○ 日本関連度●●●●●

東京科学大学の研究チームは、半導体解析における複雑な逆問題を1ミリ秒未満で解決できるタンデムニューラルネットワークを開発しました。このAIシステムは、トランジスタ測定値から半導体材料の物理パラメータをリアルタイムで推論し、従来の解析時間を数時間から数日を劇的に短縮します。

この技術は、半導体製造ラインでのリアルタイム品質チェックや、自律型研究システムへの応用が期待されます。多値性という逆問題の難しさを、二つのネットワークを直列に接続する独自のアーキテクチャで克服し、数パーセントの誤差範囲で正確な推定を可能にしました。

### ▶ 技術者の視点

東京科学大学の成果は、半導体製造における長年のボトルネックであった「逆問題」をAIで解決する画期的なものです。1ミリ秒未満という速度は、製造ラインでのリアルタイムフィードバックを可能にし、歩留まり改善や品質管理に絶大な効果をもたらします。提示された「数パーセントの誤差範囲」が、実際の製造現場で許容されるかどうかの検証は必要ですが、そのポテンシャルは非常に高いです。日本企業にとっては、【機会】として、この技術を導入することで半導体製造の効率と品質を飛躍的に向上させ、国際競争力を高めることができます。特に半導体PKG部門は、この技術の早期導入を検討し、R&D部門は、自社の製造プロセスデータを用いた実証実験を「短期」で開始すべきです。経営層は、この技術が日本の半導体産業復興の鍵となり得ることを認識し、戦略的な投資を「即時」に判断する必要があります。

## その他の注目記事

スライスPSIのAIモデル、X線回折では困難だった結晶構造中の水素原子位置を正確に特定  
技術新規性●●●●● 実用化距離●●○○○ 市場インパクト●●●●○

AIがX線回折で捉えきれなかった水素原子位置を特定。電池や燃料電池材料のシミュレーション精度向上に直結する基礎技術。

XRDiff、拡散モデルを活用し粉末X線回折データから結晶構造を予測する新手法  
技術新規性●●●●○ 実用化距離●●○○○ 市場インパクト●●●●○

PXRDデータから結晶構造を予測する拡散モデル。医薬品、触媒、バッテリー材料の構造決定を高速化し、開発期間短縮に貢献。

DP-EVAフレームワーク、大規模原子モデルの事前学習済み知識を最大化しデータ効率の高いMLIPsを開発  
技術新規性●●●●○ 実用化距離●●○○○ 市場インパクト●●●●○

転移学習でMLIPsのデータ効率を改善。クリーンエネルギー、触媒、バッテリー材料の原子シミュレーションを加速する汎用技術。

AWSとQuEra、2028年までにMegaqum規模「Libra」をAmazon Braketに導入、フォールトトレラント量子計算実現へ  
技術新規性●●●●○ 実用化距離●●○○○ 市場インパクト●●●●●

2028年目標のフォールトトレラント量子計算は、量子化学や材料シミュレーションにブレークスルーをもたらす可能性。注視が必要。

MDPI論文が機械学習MTPsを開発、AlGaNおよび関連材料の熱輸送特性を低コストで高精度予測  
技術新規性●●●●○ 実用化距離●●○○○ 市場インパクト●●●●○

AlGaNの熱輸送特性をMLIPsで高精度予測。高性能半導体デバイスの熱管理設計を効率化し、日本の半導体産業に貢献。

## 今週のアクション提案

記事評価マトリクスと機会/脅威分析を踏まえたアクション提案です。

### ■ 即時（今週中）

- 【経営企画】AI駆動型自律ラボの導入可能性について、社内R&D;部門と連携し、ロードマップ策定に着手。
- 【R&D;】最新のAI材料設計ツール（生成AI、MLIPs等）のトライアルを開始し、自社のデータとの適合性を評価。
- 【半導体PKG】東京科学大学の半導体逆問題解決技術に関する情報収集を強化し、共同研究の可能性を検討。

### ■ 短期（1ヶ月）

- 【R&D;】「解釈可能なAI」に関する社内ワークショップを開催し、技術者がAIの予測根拠を理解・活用するスキルを育成。
- 【調達】海外のAI材料科学スタートアップ（CuspAI, Radical AI等）の動向を調査し、潜在的なパートナーシップや技術導入の機会を評価。
- 【EV設計】バッテリー材料開発におけるMLIPsの活用事例を調査し、自社のシミュレーションプロセスへの導入を検討。

### ■ 中長期（四半期～）

- 【R&D;】AIとロボティクスを統合した「セルフドライビングラボ」のパイロットプロジェクトを立ち上げ、材料発見の自動化を推進。
- 【経営企画】量子コンピューティングが材料設計に与える影響を評価する専門チームを設置し、中長期的なR&D;戦略に反映。
- 【材料・素材メーカー】腐食、触媒、ポリマーなど特定機能材料のAI駆動型開発プロジェクトを強化し、市場投入までの時間を短縮。

# マテリアルインフォマティクス 採用記事 全文集

出力日: 2026-06-19

採用記事数: 49 件

## 収録記事一覧

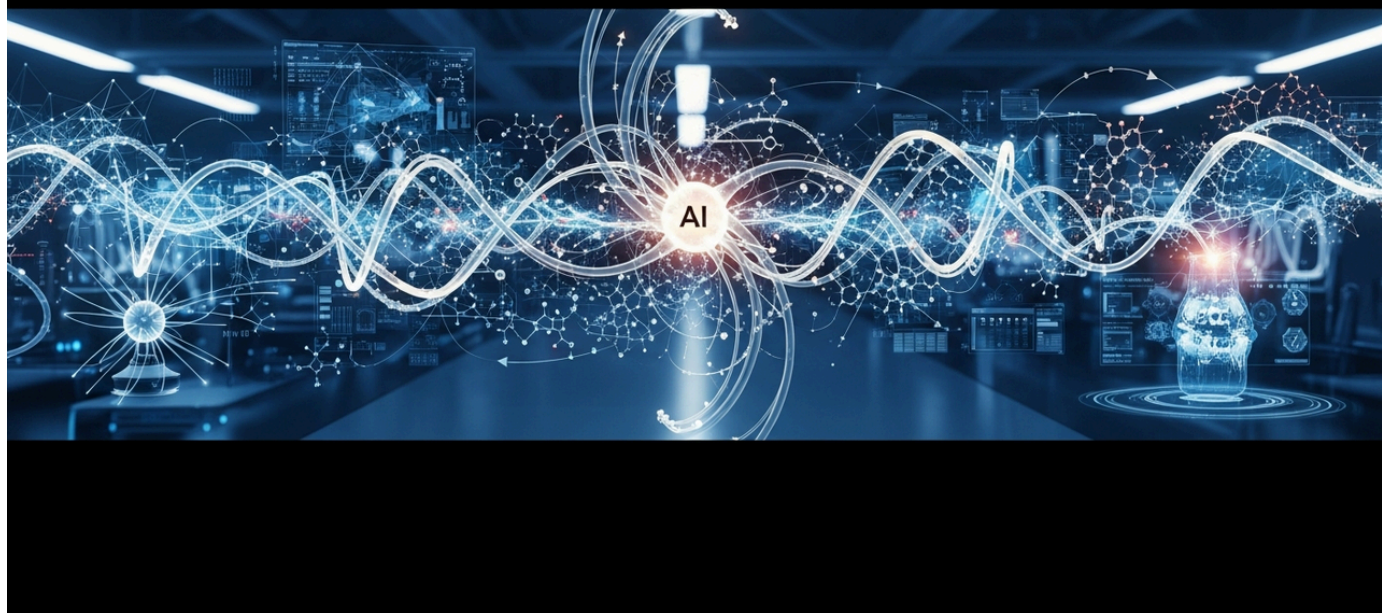
- #01 AIと生成モデルが有機半導体の発見を加速、逆設計で特性制御を強化
- #02 スイスPSIのAIモデル、X線回折では困難だった結晶構造中の水素原子位置を正確に特定
- #03 IBM、LLMを活用した進化的フレームワークで465種類の新規量子誤り訂正コード候補を発見
- #04 結晶対称性を活用したAIモデルSG-CDVAE、スピントロニクス向けに4つの安定な新規反強磁性体を特定
- #05 Leo AI、AIが機械設計における材料選択を革新し最適な高性能材料を効率的に特定
- #06 データ駆動型逆設計フレームワークにより、人間レベルの動的性能を持つロボットハンドが実現
- #07 ChemCopilotの生成AI、自然言語プロンプトで新規分子を瞬時にSMILES生成、分子設計を自動化
- #08 アメリカの教育機関、生成AIの教員育成に焦点を当てた10のベストプラクティスを公開
- #09 LLMベースの自律エージェントPhyNex、計算物理学における半導体誘電スペクトル予測などを自動発見
- #10 スウェーデン研究者、AIと物理計算を融合したQNM-Netで光学部品の逆設計を高速化
- #11 InvDesMobilityフレームワーク、キャリア移動度に基づく信頼性ゲート付き第一原理フィードバックで材料探索を効率化
- #12 アルゴン国立研究所、ISC High Performance 2026で材料・分子発見加速のためのAIとHPC統合研究を発表
- #13 腐食科学の世界モデル構築へ：DeepMindのGNoME、MatterGenが生成AI材料モデルを推進
- #14 科学生成言語モデルLOGOS、自然科学の異種タスクを単一フレームワークで統合し高精度を達成
- #15 ACS論文、オスマベンゼン錯体の構造特性予測に化学情報駆動型MLフレームワークを導入し高精度を実現
- #16 Tech Science Press誌、AI・ML・生成モデルによる材料科学のパラダイム進化を特集
- #17 XRDiff、拡散モデルを活用し粉末X線回折データから結晶構造を予測する新手法
- #18 PhononBench、AI結晶生成モデルの動的安定性を評価する大規模ベンチマークを公開
- #19 ブラウン大学とミシガン大学、金属の未発見中間相物質を安定化させ量子コンピューティングへ新たな洞察
- #20 MDPIのレビュー、製薬化学におけるML駆動型分子設計と構造-特性-性能関係の統合フレームワークを提唱
- #21 DP-EVAフレームワーク、大規模原子モデルの事前学習済み知識を最大化しデータ効率の高いMLIPsを開発

- #22 スパース性促進ファインチューニング、事前学習済み等価材料基盤モデルのドメイン適応性を強化
- #23 MLIPsの電子エンタロピー課題を解決：電荷状態埋め込みでバッテリー材料予測精度を向上
- #24 多層hBNの機械学習粗視化ポテンシャルにVirial-Matchingを導入し、2D材料のメソスケール問題を解決
- #25 液状(U,Zr)の熱物理・構造予測で機械学習SNAPがMEAMを上回り、粘度異常や二十面体短距離秩序を解明
- #26 Chemistry World誌、AIエージェントとMLIPsが触媒発見をシミュレーションからスケールアップまで加速する最前線
- #27 大規模データセットにスケールアップされた制約なしMLIPs、静的シミュレーションで既存モデルを凌駕
- #28 UniFFBench、汎用機械学習力場UMLFFsを実験測定値と照合し、材料シミュレーションの安定性・忠実度・弾性特性を評価
- #29 スウェーデン・チャルマース工科大学、物理法則組み込みAIで量子コンピューティング向け光学部品開発効率を劇的に向上
- #30 Hugging Face論文集、3D畳み込みオートエンコーダと潜在拡散モデルを組み合わせた電子密度生成フレームワークを公開
- #31 量子コンピューティング、結晶材料シミュレーションに必要な量子ビット数を4~8個削減する新フレームワーク発表
- #32 世界経済フォーラム、AIとセルフドライビングラボで材料発見を数年から数ヶ月に短縮する新戦略を提言
- #33 ワシントン大学、AIと量子コンピューティングで量子材料シミュレーションを大規模化、新現象発見
- #34 arXiv論文：計算材料科学、AI・ロボティクス統合で材料探索のリスク低減とメカニズム解明へ進化
- #35 東京科学大学・東北大学、AIの予測根拠を可視化する「解釈可能なAI」手法を開発、材料設計を加速
- #36 ジェフ・ベゾス、AI材料科学CuspAIに4億ドル出資、評価額26億ドルで炭素回収・半導体材料開発を加速
- #37 Hugging FaceがLLMの科学的発見応用プレプリントを紹介、材料・生物・化学分野での自律エージェントの可能性強調
- #38 RSC論文が「デジタル材料エコシステム」を提唱、データベースとAIエージェントで材料発見を自律化
- #39 Radical AIが「セルフドライビングラボ」で6ヶ月に1,200種の合金を生成、材料発見を加速

- #40 SandboxAQ、CHIPS法に基づき米国商務省から5億ドル獲得、半導体材料サプライチェーンの課題解決へ
- #41 AWSとQuEra、2028年までにMegaquop規模「Libra」をAmazon Braketに導入、フォールトトレラント量子計算実現へ
- #42 ResearchGate論文、制約なしMLIPsが大規模データセットで優れた精度と速度を達成、静的シミュレーションを強化
- #43 MDPI論文が機械学習MTPsを開発、AlGaNおよび関連材料の熱輸送特性を低コストで高精度予測
- #44 九州大学、説明可能なAI・ChatGPT・専門知識を融合した「ヒューマン・イン・ザ・ループ」フレームワークでAEM材料開発を効率化
- #45 ベルリンでASCENDプロジェクトが3,000万ユーロの資金を獲得、触媒発見をAI主導の閉ループシステムで革新
- #46 東京科学大学、半導体解析の逆問題を1ミリ秒未満で解決するタンデムニューラルネットワークを開発
- #47 AtomGPT.orgがオープンアクセス型エージェントAIプラットフォーム「AGAPI-Agents」を発表、材料設計を加速
- #48 パデュー大学、計算材料設計およびマテリアルズインフォマティクス分野でポストドク研究員を募集、DFT・MLIPs研究を強化
- #49 SchubertグループがAI4X会議でAI駆動型ポリマー研究を発表、高分子材料発見を加速

# AIと生成モデルが有機半導体の発見を加速、逆設計で特性制御を強化

公開日 2026年06月11日 Request PDF 国際



## 概要

機械学習と生成AIが有機半導体の設計と発見を劇的に加速することが、最新のレビュー論文で強調されました。これらのAI技術は、分子構造と特性の複雑な関係を解明し、ハイスループットスクリーニングや逆設計によって目標とする性能を持つ新材料の特定を可能にします。これにより、従来の試行錯誤による材料開発プロセスと比較して、時間とコストを大幅に削減できると期待されます。AIは、広大な化学空間の中から最適な候補を効率的に探索し、人間の研究者の能力を増幅させる強力なツールとしての可能性を秘めています。

## 詳細

### 主要成果

最新のレビュー論文により、機械学習（ML）と生成AIが有機半導体の発見と設計を加速する上で不可欠なツールとして浮上していることが示されました。特に、特定の電子特性や光学的特性を持つ有機材料の「逆設計」において、AIが従来の手法を凌駕する効率性と精度を発揮します。AIは分子構造と特性間の非線形な関係を効率的に学習し、新しい有機半導体の迅速な特定を可能にするため、今後の材料開発における重要な推進力となるでしょう。

### 技術・臨床詳細

本レビューでは、AIが有機半導体分野で活用される具体的な手法が詳細に解説されています。これには、目標特性に基づいて分子構造を設計する「逆設計」アプローチや、膨大な候補材料から有望なものを高速で選別する「ハイスループットスクリーニング」が含まれます。生成AI、例えばVariational Autoencoders (VAE)やGenerative Adversarial Networks (GAN)、グラフニューラルネットワーク (GNN)などが、新しい分子構造を生成し、その特性を予測するために利用されます。これにより、研究者は限られた実験データからでも、化学空間の未探索領域を効率的に探索し、次世代の有機エレクトロニクス、太陽電池、バイオセンサーなどに向けた高性能材料を迅速に開発できるようになります。

### 背景・業界文脈

有機半導体は、その柔軟性、軽量性、低コストな製造可能性から、フレキシブルディスプレイ、有機EL照明、有機太陽電池、ウェアラブルセンサーなど、多岐にわたるアプリケーションで注目されています。しかし、その広大な化学空間と複雑な構造-特性相関のため、従来の実験的アプローチや第一原理計算のみでは開発が非常に時間がかかり、コストも高額になるという課題がありました。AIと機械学習の導入は、このボトルネックを解消し、材料開発のプロセスを根本的に変革する可能性を秘めています。特に、生成AIによる新規分子の設計能力は、人間の直感や経験だけでは到達困難な画期的な材料の発見を促すものと期待されています。

## 今後の展望

AIの活用は、有機材料科学における発見のペースを劇的に加速させると予測されます。今後、AIモデルはより洗練され、物理法則や量子化学の知見と深く統合されることで、予測精度と生成能力がさらに向上するでしょう。これにより、単に既存材料の最適化に留まらず、これまで想像もできなかったような革新的な特性を持つ有機材料の創出が期待されます。最終的には、AIが材料科学研究のパラダイムを「探索と発見」から「設計と合成」へとシフトさせ、持続可能な社会の実現に貢献する新技術の開発を後押しするでしょう。

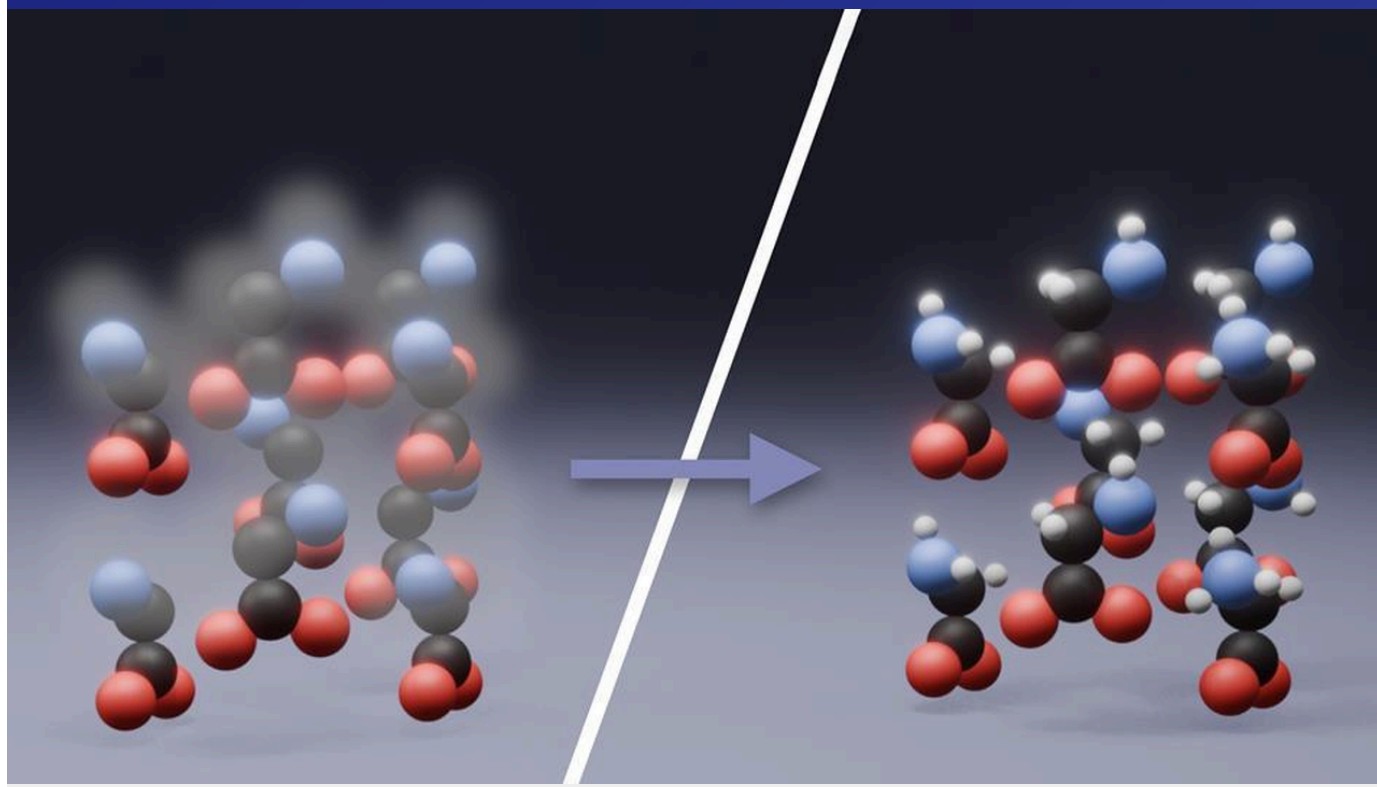
元記事:

[https://www.researchgate.net/publication/406481445\\_Organic\\_Materials\\_of\\_Tomorrow\\_Horizons\\_of\\_Artificial\\_I](https://www.researchgate.net/publication/406481445_Organic_Materials_of_Tomorrow_Horizons_of_Artificial_I)

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# スイスPSIのAIモデル、X線回折では困難だった結晶構造中の水素原子位置を正確に特定

公開日 2026年06月19日 Chemistry World スイス



## 概要

スイスのパウル・シェラー研究所（PSI）の研究者らが、無機結晶構造内でこれまで特定が困難だった欠落水素原子の位置を正確に配置するAIモデルを開発しました。この新技術は、従来のX線回折では困難だった水素原子の検出を可能にし、材料シミュレーションの精度を大幅に向上させます。水素原子の位置情報は、超伝導体や燃料電池、電池材料など、多くの先端材料の特性を理解し、設計する上で極めて重要です。このブレークスルーは、新材料の発見と最適化に新たな道を開くものです。

## 詳細

### 主要成果

スイスのパウル・シェラー研究所（PSI）の研究チームが、無機結晶構造において、X線回折では捉えきれなかった水素原子の位置を正確に特定できる画期的なAIモデルを開発しました。この技術は、従来の材料科学の課題であった水素原子の正確な局在化を可能にし、材料の特性評価とシミュレーションの精度を大幅に向上させるものです。

### 技術・臨床詳細

開発されたAIモデルは、既存の結晶構造データと機械学習アルゴリズムを組み合わせることで、欠落している水素原子の最適な配置を予測します。水素原子はX線に対して散乱能が低いため、X線回折法ではその位置を正確に決定することが困難でした。このAIモデルは、より重い原子の配置から得られる情報を活用し、結晶構造内の水素結合やその他の相互作用を推論することで、これまで見過ごされてきた水素原子の役割を明らかにします。これにより、例えば、超伝導材料の電子伝導経路、燃料電池におけるプロトン輸送、固体電池のイオン移動メカニズムなど、水素原子が決定的な役割を果たす材料の設計と性能予測において、より信頼性の高いシミュレーションが実現します。

### 背景・業界文脈

材料科学分野では、第一原理計算や分子動力学シミュレーションが新材料設計の重要なツールとなっていますが、シミュレーションの初期構造の精度は最終的な予測結果に大きく影響します。特に水素原子は、その軽さから量子効果が大きく、材料の構造的安定性、電子特性、格子振動などに深く関与しています。これまでの実験手法では、中性子回折など一部の手法を除いて水素原子の直接的な位置特定は難しく、材料設計における不確実性の要因となっていました。PSIによる今回のAIモデルは、この長年のギャップを埋め、計算材料科学におけるモデルの信頼性を飛躍的に高める可能性を秘めています。

## 今後の展望

このAIモデルの登場は、水素を含む材料の設計において新たな時代を切り開くものです。研究者やエンジニアは、より正確な構造情報に基づき、革新的な超伝導体、高効率な燃料電池電解質、次世代バッテリー材料、さらには水素貯蔵材料などの開発を加速させることが可能になります。将来的には、この技術が様々な材料のデータベースに統合され、AI駆動型の自律的な材料発見プラットフォームの中核的な要素となることで、クリーンエネルギー技術や量子技術など、社会の持続可能性と発展に貢献する分野でのイノベーションが加速されることが期待されます。

元記事: <https://www.chemistryworld.com/news/ai-model-fills-in-the-gaps-in-crystal-structures-by-placing-missing-hydrogen-atoms/4023712.article>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# IBM、LLMを活用した進化的フレームワークで465種類の新規量子誤り訂正コード候補を発見

公開日 2026年06月11日 IBM Research アメリカ

$$y+y^2+x^3$$

$$xy^3+xy^5+x^2$$

$$y+x^3y^2+x^4y$$

## 概要

IBMの研究者らは、大規模言語モデル（LLM）を用いた進化的フレームワークを開発し、量子誤り訂正コードの探索において465もの新規候補を特定しました。この画期的なアプローチは、LLMが量子コンピューティングの複雑な問題を理解し、解決に貢献できることを示しています。数千ものコードバリエーションを効率的に探索することで、量子コンピューティングにおける誤り訂正の進歩を加速し、最終的にはより堅牢な量子プロセッサの開発に貢献するものです。これは、古典AIと量子コンピューティングの融合が新たな科学的発見を推進する可能性を明確に示しています。

## 詳細

### 主要成果

IBMの研究者チームは、大規模言語モデル（LLM）と進化的フレームワークを統合することで、量子誤り訂正コードの探索において465種類の新規候補コードを特定するという画期的な成果を達成しました。この革新的なワークフローは、量子コンピューティングの基盤技術である誤り訂正の分野に新たな発見をもたらし、より安定した量子システムの実現に向けた道を拓きます。

### 技術・臨床詳細

この研究では、LLMの自然言語理解能力と、探索空間を効率的にナビゲートする進化的アルゴリズムを組み合わせた独自のフレームワークが採用されています。LLMは量子誤り訂正の原理とコード構造に関する情報を学習し、新しいコード候補の提案や既存のコードの変異を生成します。その後、進化的アルゴリズムがこれらの候補を評価し、性能の良いものを選択してさらに洗練させるというクローズドループのプロセスを実行します。これにより、数千ものコードバリエーションが効率的に探索され、従来手法では見過ごされがちだった新たなコードが発見されました。この手法は、誤り訂正の複雑なルールセットをLLMが理解し適用できることを実証し、量子ハードウェアの信頼性を向上させるための具体的な解決策を提供します。

### 背景・業界文脈

量子コンピューティングは、その強力な計算能力により、医薬品開発、材料科学、金融モデリングなど多岐にわたる分野で革新をもたらす可能性を秘めています。しかし、量子ビットのデリケートな性質上、ノイズや量子ビットのエラーは量子コンピューティングの実用化における最大の課題の一つです。量子誤り訂正コードは、これらのエラーを検出し修正するための必須技術であり、誤り耐性のある量子コンピュータを実現するための鍵となります。従来の誤り訂正コードの設計は、高度な数学的知識と試行錯誤に依存していましたが、今回IBMが開発したAI駆動型アプローチは、その探索と発見のプロセスを劇的に加速させることができます。

## 今後の展望

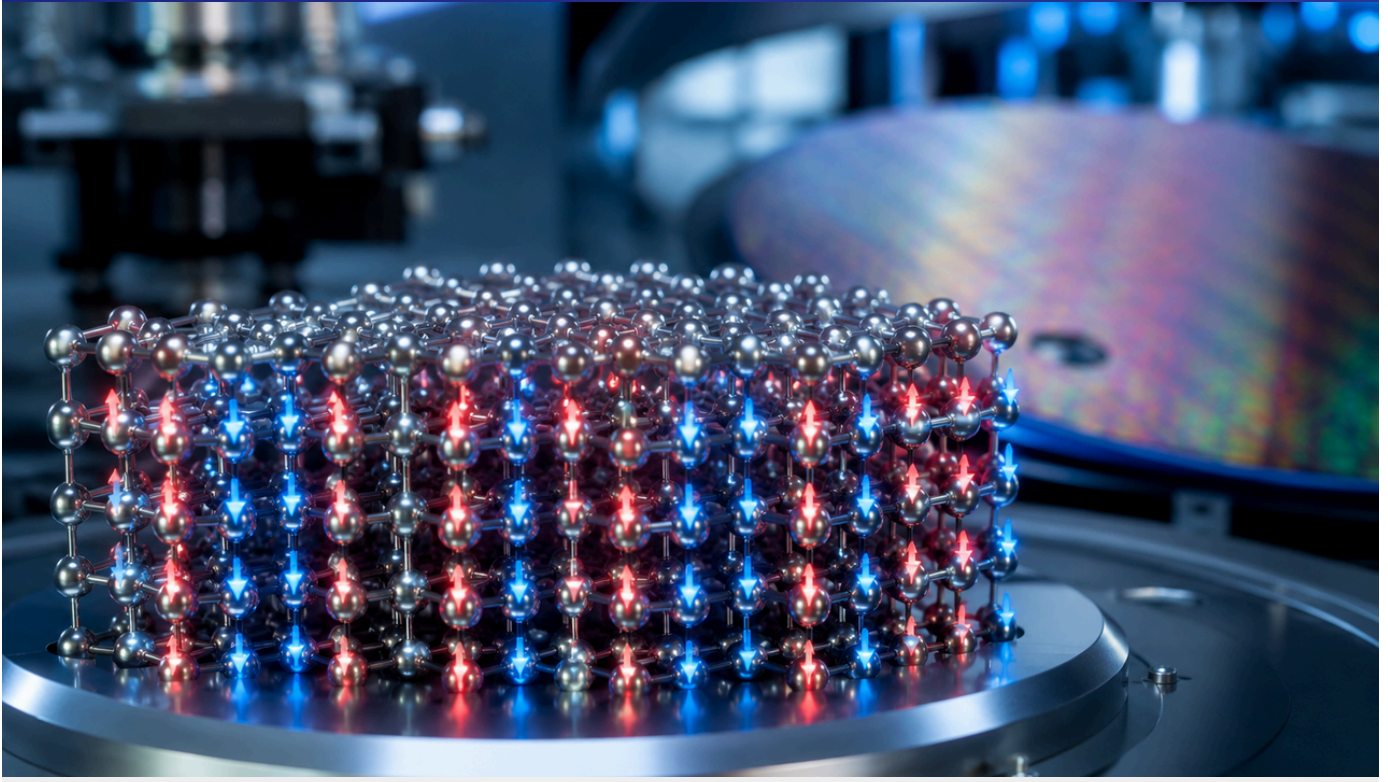
IBMの研究は、古典AIと量子コンピューティングの融合が新たな科学的フロンティアを開拓する可能性を明確に示しています。今回発見された新規量子誤り訂正コード候補は、将来の量子コンピューティングシステムの安定性と信頼性を大幅に向上させる基盤となるでしょう。今後は、これらのコードの実験的検証が進められるとともに、LLMベースの発見フレームワークが他の量子アルゴリズムやプロトコルの設計にも応用されることが期待されます。これにより、量子技術の実用化が加速し、社会に広範な影響を与える画期的なアプリケーションが登場する可能性が高まります。

元記事: <https://research.ibm.com/blog/ai-for-qec>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# 結晶対称性を活用したAIモデルSG-CDVAE、スピントロニクス向けに4つの安定な新規反強磁性体を特定

公開日 2026年06月14日 AZoM 国際



## 概要

新しい対称性ガイド型AIモデル（SG-CDVAE）が、スピントロニクス応用に特化した4つの安定な反強磁性体候補を特定しました。この生成深層学習フレームワークは、結晶学的空間群情報を直接モデルに組み込むことで、磁性結晶材料の逆設計プロセスを大幅に加速します。SG-CDVAEは、従来の計算手法よりも高速かつ効率的に、望ましい磁気特性を持つ材料を発見できる可能性を示しており、次世代のデータ記憶装置や量子技術の開発に貢献するでしょう。

## 詳細

### 主要成果

結晶学的空間群情報を直接学習プロセスに組み込んだ対称性ガイド型AIモデル「SG-CDVAE」が開発され、スピントロニクス応用に有望な4つの安定な反強磁性体候補を特定しました。この生成深層学習フレームワークは、磁性結晶材料の逆設計において、従来の計算経路よりもはるかに高速で効率的な材料探索を可能にします。

### 技術・臨床詳細

SG-CDVAE (Symmetry-Guided Crystal Diffusion Variational Autoencoder) は、生成AIの一種である拡散モデルと変分オートエンコーダの原理を、結晶対称性の物理的制約と組み合わせることで機能します。具体的には、材料の持つ固有の結晶学的空間群情報をモデルの入力として直接利用し、これにより、物理的に実現可能で安定な結晶構造のみを効率的に生成します。このモデルは、スピントロニクス材料に求められる特定の磁気特性（例えば、高いネール温度や特定の磁気異方性）を持つ材料を逆設計する能力を持ち、今回の研究では、密度汎関数理論 (DFT) 計算によってその安定性が検証された4つの新規反強磁性体候補を発見しました。このアプローチは、探索空間を大幅に削減し、計算コストを低減しながら、ターゲット特性を持つ材料を効率的に特定します。

### 背景・業界文脈

スピントロニクスは、電子の電荷だけでなくスピンも利用する次世代のエレクトロニクス技術であり、より高速、低消費電力、高密度のデータ記憶装置や量子コンピューティング技術への応用が期待されています。反強磁性体は、その固有の磁気秩序と外部磁場に対する非感受性から、スピントロニクスデバイスの主要コンポーネントとして注目されています。しかし、有望な反強磁性体の発見は、その複雑な磁気構造と合成の難しさから、非常に困難な課題でした。従来の材料探索は、膨大な候補材料の計算や実験に頼るため、時間とリソースを大量に消費します。SG-CDVAEのようなAIモデルは、このボトルネックを解消し、より効率的でターゲット指向の材料設計を可能にすることで、スピントロニクス分野の革新を加速させます。

## 今後の展望

SG-CDVAEのような対称性ガイド型生成AIモデルは、磁性材料の発見に革命をもたらす可能性を秘めています。今後、このフレームワークは、反強磁性体だけでなく、強磁性体、トポロジカル材料、超伝導体など、様々な機能性結晶材料の探索に応用されることが期待されます。より複雑な特性制約や合成経路の考慮、さらには実験とのフィードバックループを統合することで、AIが自律的に新しい材料を発見し、最適化する「マテリアルズ・ファクトリー」のようなシステムの実現に一步近づくでしょう。これにより、次世代の電子デバイス、センサー、エネルギー貯蔵技術などの開発が大幅に加速されると見込まれます。

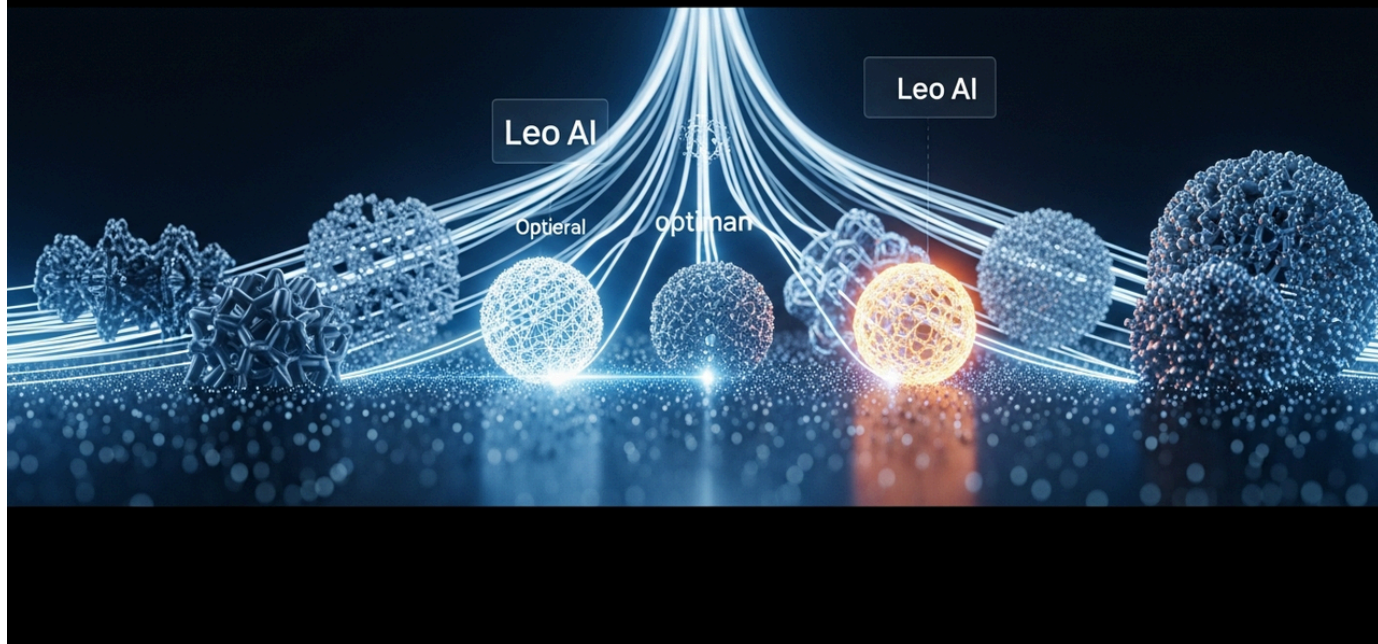
---

元記事: <https://www.azom.com/news.aspx?newsID=65528>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# Leo AI、AIが機械設計における材料選択を革新し最適な高性能材料を効率的に特定

公開日 2026年06月17日 Leo AI 国際



## 概要

AI技術が機械設計分野における材料選択プロセスを根本的に変革し、高性能材料の特定と最適化を劇的に効率化することが報告されました。AIは、多目的最適化アルゴリズムを駆使し、強度、重量、コスト、環境への影響など複数の性能指標に基づいて、従来の慣習的な選択肢を超えた最適な材料候補を提案します。この進歩により、エンジニアは複雑な設計要件を満たす材料を迅速かつ正確に選定できるようになり、製品開発の時間とコストが削減されます。AIによる材料選択は、より革新的で高性能な製品の実現を可能にします。

## 詳細

### 主要成果

AI技術が機械設計における材料選択プロセスを革新し、エンジニアが多目的最適化を通じて、強度、重量、コスト、環境への影響など複数の性能指標を考慮した最適な材料を効率的に特定できることが実証されました。これにより、従来の経験や慣習に頼る材料選定から脱却し、よりデータ駆動型で厳密なアプローチが可能になります。

### 技術・臨床詳細

AIは、機械学習アルゴリズムと大規模な材料データベースを組み合わせることで機能します。まず、設計者が入力する特定の要件（例：必要な強度、許容重量、動作温度範囲、予算制約）を解釈します。次に、材料データベースから関連するデータを抽出し、シミュレーションモデルや予測モデルを用いて、それぞれの候補材料が設計要件をどの程度満たすかを評価します。特に、AIは多目的最適化（Multi-objective Optimization）に優れており、互いにトレードオフの関係にある複数の目標（例：軽量化とコスト削減）を同時に考慮し、最適なバランスを見つけることができます。例えば、航空宇宙分野では軽量かつ高強度な複合材料、医療機器では生体適合性と耐久性を兼ね備えた材料など、特定の用途に合わせた最適な材料を迅速にスクリーニングし、最終的な材料選択の意思決定を支援します。

### 背景・業界文脈

機械設計における材料選択は、製品の性能、安全性、コスト、製造性、そして市場競争力を左右する極めて重要な工程です。しかし、利用可能な材料の種類は膨大であり、各材料の特性も複雑に絡み合っているため、最適な選択を行うことは長年の課題でした。従来の材料選択プロセスは、エンジニアの経験、ハンドブックの参照、限定的なシミュレーションに依存することが多く、時間とコストがかかる上に、既知の材料の中からはか選択肢が見つからないという制約がありました。AIの導入は、このプロセスを自動化し、人間では見落としがちな新しい材料の組み合わせや、従来とは異なるアプローチによる最適な材料を提案することで、設計の自由度と効率を劇的に向上させます。

## 今後の展望

AI駆動型材料選択の導入は、機械設計の未来を大きく変えるでしょう。今後は、AIが単に材料を提案するだけでなく、設計全体と材料選択を統合したジェネレーティブデザインのワークフローの中核を担うことが期待されます。これにより、製品の設計サイクルが短縮され、市場投入までの時間が早まります。さらに、持続可能性への要求が高まる中で、AIはリサイクル性や環境負荷の低い材料の選択、材料のライフサイクル全体を考慮した最適化にも貢献するでしょう。AIは、高性能、高耐久性、低コスト、そして環境に配慮した次世代の製品開発を実現するための不可欠な技術となります。

---

元記事: <https://www.getleo.ai/blog/ai-materials-selection-mechanical-engineering>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# データ駆動型逆設計フレームワークにより、人間レベルの動的性能を持つロボットハンドが実現

公開日 2026年06月18日 MDPI 国際



## 概要

データ駆動型逆設計フレームワークが、高周波数の動的性能に最適化された、人間のような器用なロボットハンドの開発を可能にしました。このロボットハンドは、リズムゲームやテトリスのような複雑なタスクで検証され、持続的かつ高精度な動的操作性能を発揮することを示しました。この成果は、ロボティクス分野におけるヒューマノイドロボットや精密マニピュレーターの設計に革命をもたらし、より高度な自動化や人間とロボットの協働を促進するものです。これにより、製造、医療、サービスロボティクスなど、幅広い分野での応用が期待されます。

## 詳細

### 主要成果

データ駆動型逆設計フレームワークを適用することで、高周波数の動的性能に最適化され、人間と同等の器用さを持つロボットハンドの開発が実現しました。この革新的なハンドは、リズムゲームやテトリスといった構造化された動的タスクにおいて、持続的かつ高精度な操作能力を実証しました。

### 技術・臨床詳細

この研究で開発されたデータ駆動型逆設計フレームワークは、まず望ましい動的性能特性（例：特定の周波数での応答速度、精度、力覚フィードバック）を目標値として設定します。次に、広範な材料特性、アクチュエータの選択肢、メカニカルデザインパラメータを含むデータベースを探索します。機械学習モデルは、これらのパラメータと実際の性能データとの関係を学習し、目標性能を達成するための最適な設計パラメータを逆算します。この最適化プロセスは、従来の試行錯誤による設計サイクルを大幅に短縮し、計算効率を高めます。ロボットハンドの検証は、リズムゲームやテトリスのような高速かつ精密な動作が要求されるタスクを通じて行われ、これによりハンドが動的な操作シナリオにおいて一貫して優れた性能を発揮することが確認されました。例えば、テトリスのブロックをリアルタイムで認識し、適切な向きに回転させて配置する際にも、人間と同等かそれ以上の速度と精度でタスクを完了することが可能になりました。

### 背景・業界文脈

現代のロボティクスにおいて、特にマニピュレーターやロボットハンドは、多様なタスクをこなすための中心的な要素です。産業用ロボットは高い精度と速度を持つものの、その柔軟性は限られており、人間が行うような複雑で繊細な器用さを再現することは困難でした。ヒューマノイドロボットやサービスロボットの分野では、人間環境での複雑な相互作用に対応するために、より人間らしい動的性能を持つハンドが強く求められています。従来の設計手法では、膨大な数の設計パラメータと材料の組み合わせから最適なものを手動で選択する必要があり、時間とコストが膨大にかかっていました。今回のデータ駆動型逆設計フレームワークは、このボトルネックを解消し、より効率的かつ科学的なアプローチで高性能なロボットハンドを実現する道を開きます。

## 今後の展望

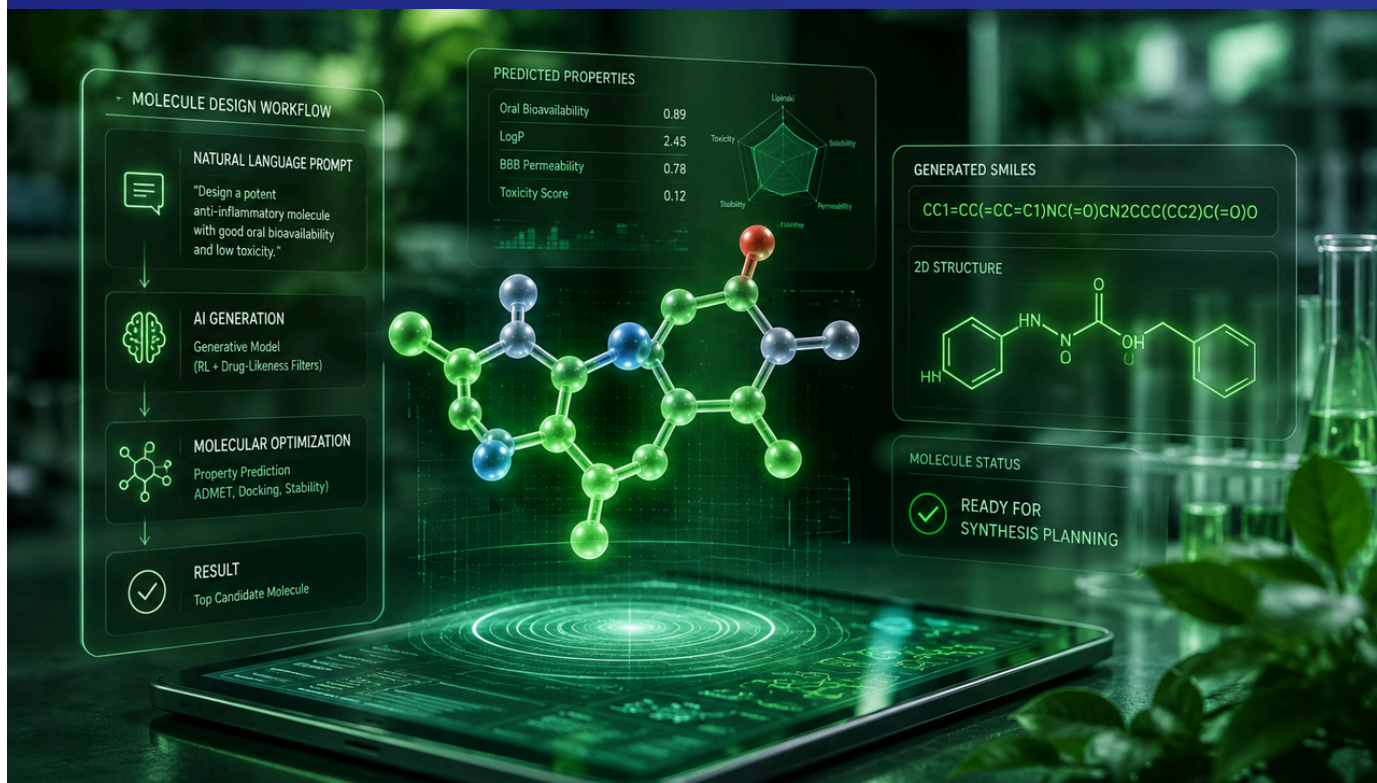
このデータ駆動型逆設計フレームワークは、ロボットハンド設計だけでなく、様々なロボット部品や機能性材料の最適化に応用される可能性を秘めています。将来的には、この技術が製造業の自動化、医療分野（例：手術支援ロボット）、災害救助、サービスロボティクスなど、多岐にわたる分野でのロボットの能力を向上させるでしょう。特に、人間との協働が求められる環境において、より自然で安全、かつ効率的なインタラクションを実現するための基盤となることが期待されます。これにより、ロボットは単なるツールの域を超え、より高度なパートナーとしての役割を果たすようになり、社会全体の生産性と生活の質の向上に貢献するでしょう。

元記事: <https://www.mdpi.com/2313-7673/11/6/434>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# ChemCopilotの生成AI、自然言語プロンプトで新規分子を瞬時にSMILES生成、分子設計を自動化

公開日 2026年06月17日 ChemCopilot 国際



## 概要

ChemCopilotは、科学者が自然言語プロンプトを使って新規分子を設計し、SMILES文字列を瞬時に生成できる生成AI for Molecular Designの能力を紹介しました。この技術は、分子設計と実際の配合性能との間のギャップを、自動化されたクローズドループプロセスで効率的に埋めることを目指しています。これにより、研究開発のサイクルが大幅に短縮され、創薬、材料科学、化学産業におけるイノベーションが加速することが期待されます。従来の手動による分子設計プロセスに比べて、時間とリソースを劇的に削減する可能性があります。

## 詳細

### 主要成果

ChemCopilot社は、生成AI for Molecular Designが自然言語プロンプトを用いて、科学者が要望する新規分子をオンデマンドで設計し、瞬時にSMILES文字列として出力できる画期的な技術を発表しました。この技術は、分子設計プロセスを大幅に簡素化し、より直感的かつ効率的なものに変革します。

### 技術・臨床詳細

この生成AIシステムは、大規模な化学データベースと機械学習モデルによって訓練されており、ユーザーが「抗炎症作用を持つ、毒性の低い分子を設計したい」といった自然言語の記述を入力すると、AIがその要求を解釈し、対応するSMILES文字列（分子の構造を一行で表現する標準的な表記法）を生成します。SMILES文字列は、その後のシミュレーション、合成計画、および特性評価プロセスで直接利用可能です。ChemCopilotのAIは、単に分子を生成するだけでなく、予測モデルを統合して生成された分子が目標とする特性（例：溶解度、薬理活性、合成可能性）を持つ可能性を評価します。さらに、このシステムは、分子設計から実際の実験結果に至る「クローズドループ」の自動化を強調しており、AIが実験データを学習し、設計プロセスを継続的に改善することで、設計と性能のギャップを埋めることを目指しています。

### 背景・業界文脈

従来の分子設計は、化学者の専門知識、試行錯誤の実験、そして計算化学的手法に大きく依存しており、時間とコストがかかるプロセスでした。特に、広大な化学空間の中から特定の特性を持つ新規分子を発見することは、非常に困難な課題です。創薬、新素材開発、アグロケミカルなど多くの産業分野で、分子設計の効率化は長年の切望されてきました。生成AIの登場は、このボトルネックを解消する強力な手段として注目されており、人間の専門知識とAIの探索能力を組み合わせることで、開発サイクルを劇的に短縮し、市場投入までの時間を早める可能性を秘めています。

## 今後の展望

ChemCopilotの生成AIは、分子設計の未来を再定義する可能性を秘めています。今後、この技術は、より複雑な多目的最適化問題に対応し、物理化学的制約や合成実現可能性の制約をより厳密に統合する方向に進化するでしょう。また、実験ロボットプラットフォームとの統合が進めば、AIが自律的に分子を設計し、合成し、評価するという完全自動化された発見サイクルが実現する可能性もあります。これにより、研究開発の生産性が飛躍的に向上し、新薬、先進材料、持続可能な化学プロセスなどの創出が加速され、社会に大きな経済的・技術的影響をもたらすことが期待されます。

---

元記事: <https://www.chemcopilot.com/blog/generative-ai-for-molecule-design-from-prompt-to-smiles>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# アメリカの教育機関、生成AIの教員育成に焦点を当てた 10のベストプラクティスを公開

公開日 2026年06月12日 Every Learner Everywhere and Online Learning Consortium アメリカ



## 概要

Every Learner EverywhereとOnline Learning Consortiumは、生成AIを高等教育に効果的に統合するための教員育成に関する10のベストプラクティスを共同で発表しました。このガイドは、教育学的根拠、倫理的責任、持続可能性に焦点を当て、AIが教育現場でどのように活用されるべきかに関する具体的な指針を提供します。この取り組みは、教育者がAIツールを自信を持って活用し、学生の学習体験を向上させることを支援するとともに、生成AIのより広範な学術分野への統合と責任ある利用を促進するものです。高等教育機関におけるAI導入の加速に貢献することが期待されます。

## 詳細

### 主要成果

Every Learner EverywhereとOnline Learning Consortiumは、生成AIの教員育成における「10のベストプラクティス」を共同で公開しました。このガイドは、教育におけるAIの倫理的かつ効果的な統合を促進するための実践的な枠組みを提供し、教員が自信を持ってAIツールを活用し、学生の学習成果を最大化できるよう支援することを目的としています。

### 技術・臨床詳細

このガイドは、教育者が生成AIをカリキュラムに組み込む際の具体的なアプローチを詳述しています。ベストプラクティスには、AIツールの機能と限界を理解すること、教育目標に合わせたAI利用のシナリオを開発すること、学生にAI倫理と責任ある利用を教えること、そしてAIツールの評価と改善のための継続的なフィードバックループを確立することなどが含まれます。また、教育者がAIを教材作成、個別学習支援、評価プロセスの効率化などに活用するための具体的な戦略も提示されています。これらのプラクティスは、単にAIツールの操作方法を教えるだけでなく、教育学的根拠に基づいた深い理解を促し、AIが教育の質を向上させる可能性を最大限に引き出すことを重視しています。

### 背景・業界文脈

生成AI技術の急速な発展は、高等教育を含む様々な分野に大きな影響を与えています。大学やカレッジは、AIがもたらす機会と課題に直面しており、教員がこの新しい技術をどのように活用し、学生を未来のAI駆動型社会のために準備させるかという点で、明確な指導が求められています。これまでのAI教育の取り組みは、技術的な側面に偏りがちでしたが、このガイドは、教育者がAIを責任を持って、かつ効果的に統合するための教育学的、倫理的、そして持続可能な視点を提供します。これにより、教育現場でのAI導入における不安や抵抗感を軽減し、より建設的な対話と実践を促進することを目的としています。

## 今後の展望

このベストプラクティスの導入は、高等教育機関における生成AIの責任ある統合を加速させる重要な一歩となります。今後は、これらのプラクティスが広く採用され、教育者がAIの潜在能力を最大限に引き出し、学生がAI時代に必要なスキルを習得できるような学習環境が整備されることが期待されます。また、このガイドラインは、材料科学のような専門分野でのAI利用に関する教員育成の基礎としても機能し、特定の技術分野におけるAI教育の標準化と品質向上に貢献するでしょう。最終的には、AIを活用した教育がよりパーソナライズされ、効率的で、倫理的な学習体験を提供し、次世代の研究者やイノベーターを育成することに繋がります。

---

元記事: <https://www.everylearnereverywhere.org/es/blog/10-best-practices-for-generative-ai-faculty-development-insights-from-the-field/>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# LLMベースの自律エージェントPhyNex、計算物理学における半導体誘電スペクトル予測などを自動発見

公開日 2026年06月12日 arXiv 国際



## 概要

計算物理学における科学的発見を加速する自律エージェント「PhyNex」が開発されました。PhyNexは大規模言語モデル（LLM）ガイド検索とドメイン固有の計算ツールを組み合わせることで、半導体の誘電スペクトル予測や量子バッテリーの充電プロトコル最適化といった複雑なタスクの解空間を体系的に探索します。この技術は、LLMが科学研究の各段階で人間のような推論と計画能力を発揮し、専門家レベルの課題を解決できることを示しており、研究者がより迅速に成果を導き出すことを可能にします。これは、AIによる科学的発見の新たなパラダイムを提示するものです。

## 詳細

### 主要成果

計算物理学における科学的発見を加速する自律エージェント「PhyNex」が開発されました。PhyNexは、大規模言語モデル（LLM）を基盤としたガイド検索と、密度汎関数理論（DFT）計算などのドメイン固有の計算ツールを組み合わせることで、半導体の誘電スペクトル予測や量子バッテリーの充電プロトコル最適化といった複雑なタスクの解空間を体系的かつ効率的に探索します。

### 技術・臨床詳細

PhyNexエージェントは、LLMをその意思決定の中核に据え、与えられた科学的課題に対して、問題の分解、解決戦略の立案、適切な計算ツールの選択、結果の解釈、そして次のステップの計画を自律的に行います。例えば、半導体の誘電スペクトル予測では、LLMが材料の組成と構造に関する初期情報から、必要な物理モデルや計算パラメータを特定し、DFT計算を実行するためのスクリプトを生成します。計算結果はLLMにフィードバックされ、その解釈に基づいて次の計算条件を調整したり、異なるアプローチを試したりします。この反復的なクローズドループ学習により、PhyNexは、人間が行うような試行錯誤のプロセスを高速かつ自動で実行し、従来の計算手法では到達困難だった最適な解や新規発見を導き出すことが可能になります。量子バッテリーの充電プロトコル最適化では、LLMが量子状態の進化を予測し、最適な充電効率を達成するためのパルスシーケンスを提案します。

### 背景・業界文脈

計算物理学は、材料科学、量子化学、エネルギー技術など、多くの科学分野において基礎的な知見を提供する重要な役割を担っています。しかし、複雑な物理システムをシミュレーションするためには、高度な専門知識、膨大な計算資源、そして長時間の試行錯誤が必要です。特に、新しい材料や物理現象を発見するプロセスは、人間が行う探索に大きく依存していました。LLMの登場は、自然言語による指示を理解し、複雑な知識を統合する能力により、この状況を変える可能性を秘めています。PhyNexのようなLLMベースのエージェントは、研究者が直面する計算物理学のボトルネックを解消し、発見の速度と効率を劇的に向上させるための強力なツールとなります。

## 今後の展望

PhyNexの開発は、AIが単なる計算ツールではなく、自律的な科学者として機能し始める時代の到来を示唆しています。将来的には、このようなLLMベースのエージェントが、計算物理学のみならず、化学、生物学、材料科学など、より広範な自然科学分野での発見プロセスを自動化・加速させることが期待されます。例えば、新薬候補の設計、触媒の最適化、複雑なポリマーの挙動予測など、様々な応用が考えられます。これにより、研究者はルーティンワークから解放され、より概念的な問題解決や創造的な思考に集中できるようになり、科学的フロンティアのさらなる拡大に貢献するでしょう。AIと科学の協働は、前例のないペースでイノベーションを推進する可能性を秘めています。

元記事: <https://arxiv.org/html/2606.14266v1>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# スウェーデン研究者、AIと物理計算を融合したQNM-Netで光学部品の逆設計を高速化

公開日 2026年06月15日 Laser Photonics Rev. スウェーデン



## 概要

スウェーデンの研究者たちは、機械学習と物理計算を組み合わせた新しい手法「QNM-Net」を開発し、フォトニクス部品の設計を大幅に高速化することに成功しました。QNM-Netは、従来のニューラルネットワークと比較してはるかに少ないデータで高いスペクトル精度を達成し、フォトニック結晶スラブやメタサーフェスといった複雑な光学部品の逆設計に適用されました。この技術は、量子コンピューティングや高度なセンサー、通信システム向けの革新的な光学デバイス開発を加速する可能性を秘めています。

## 詳細

### 主要成果

スウェーデンの科学者たちは、機械学習と物理計算を組み合わせることで、フォトニクス部品の設計プロセスを劇的に加速する新しい手法「QNM-Net」を開発しました。このハイブリッドアプローチは、従来のニューラルネットワークよりもはるかに少ないデータで優れたスペクトル精度を達成し、フォトニック結晶スラブやメタサーフェスといった複雑な光学構造の逆設計を効率化します。

### 技術・臨床詳細

QNM-Net (Quasi-Normal Mode Network) は、物理学の準正規モード (QNM) 理論から得られる基礎的な物理法則をニューラルネットワークのアーキテクチャに直接組み込むことで、その効率性を高めています。これにより、AIモデルは物理的な制約を最初から学習するため、訓練に必要なデータ量を大幅に削減できます。従来の純粋なデータ駆動型AIモデルは、膨大な量のシミュレーションデータや実験データを必要としましたが、QNM-Netは物理学的洞察を融合することで、データ効率を向上させ、訓練時間を短縮しました。この手法は、特に特定の波長を透過または反射するメタサーフェスの設計や、光信号を精密に制御するフォトニック結晶スラブの最適化に威力を発揮します。逆設計タスクでは、望ましい光学応答 (例：透過率スペクトルや反射率スペクトル) を入力として、それに対応する最適な材料構造をQNM-Netが出力します。

### 背景・業界文脈

フォトニクス技術は、光通信、センサー、量子コンピューティング、医療画像など、様々な分野で不可欠な役割を担っています。しかし、高性能な光学部品、特にナノスケールで光を制御するメタマテリアルやフォトニック結晶の設計は、その複雑な電磁場相互作用のため、極めて困難で時間のかかる作業でした。従来の設計手法は、膨大なパラメータ空間を手動で探索するか、計算負荷の高い最適化アルゴリズムに依存していましたが、これらはいずれも非効率的でした。AIの導入は、この設計ボトルネックを解消し、より迅速かつ効果的に革新的な光学デバイスを開発するための強力な手段として期待されています。QNM-Netのような物理情報を取り込んだAIは、データ量を削減しつつ精度を確保できるため、現実の設計問題に対する実用的なソリューションを提供します。

## 今後の展望

QNM-Netの開発は、物理学とAIの融合が科学技術の新たなフロンティアを切り開く可能性を明確に示しています。今後、この手法はフォトニクス分野に留まらず、材料科学、音響学、電磁気学など、物理法則が支配する他の設計問題にも応用されることが期待されます。より複雑な光学システム（例：統合フォトニック回路、適応光学システム）の設計、さらには合成プロセスまで考慮した設計の自動化が進むでしょう。これにより、量子コンピューティングのハードウェア基盤、超高速通信デバイス、次世代イメージング技術などの開発が大幅に加速され、科学研究から産業応用まで、広範な領域に多大な影響をもたらすと予測されます。

---

元記事: [https://www.optica-opn.org/home/newsroom/2026/june/a\\_little\\_physics\\_improves\\_ai\\_optical\\_design/](https://www.optica-opn.org/home/newsroom/2026/june/a_little_physics_improves_ai_optical_design/)

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# InvDesMobilityフレームワーク、キャリア移動度に基づく信頼性ゲート付き第一原理フィードバックで材料探索を効率化

公開日 2026年06月16日 arXiv 国際



## 概要

InvDesMobilityは、キャリア移動度に関する信頼性ゲート付き第一原理フィードバックを利用したクローズドループ型逆材料設計フレームワークです。このフレームワークは、自動DFT計算、生成構造提案、取得ランキングを統合し、高価な計算特性から学習するための監査可能で効果的なアプローチを材料探索において提供します。これにより、電子デバイス、エネルギー変換、触媒など、高移動度材料が不可欠な分野での新材料開発が大幅に加速されます。従来の試行錯誤に比べて、より科学的かつ効率的な材料発見が可能になります。

## 詳細

### 主要成果

新しいクローズドループ型逆材料設計フレームワーク「InvDesMobility」が発表されました。これは、キャリア移動度に関する信頼性ゲート付き第一原理フィードバックを中核とし、自動密度汎関数理論（DFT）計算、生成構造提案、および取得ランキングを統合することで、高価な計算特性から効率的かつ監査可能な方法で学習し、材料探索を加速します。

### 技術・臨床詳細

InvDesMobilityフレームワークは、以下の主要な要素で構成されています。まず、生成AIモデルが、特定の目的関数（例えば、高いキャリア移動度）を満たす可能性のある新規材料構造を提案します。次に、これらの提案された構造に対して自動DFT計算が実行され、そのキャリア移動度などの物理特性が第一原理レベルで精密に評価されます。ここで重要なのは、「信頼性ゲート」です。計算結果の信頼性が事前に設定された基準を満たさない場合、その結果は学習データとして却下されるか、さらなる詳細な計算が要求されます。これにより、不確実性の高いデータに基づく誤った学習を防ぎます。最後に、取得ランキングモジュールが、最も有望な材料候補を優先順位付けし、次の設計サイクルにフィードバックします。このクローズドループアプローチにより、材料探索プロセス全体が効率化され、特に半導体や熱電材料など、キャリア移動度が重要な要素となる材料の発見に大きな優位性をもたらします。

### 背景・業界文脈

現代のテクノロジーでは、高性能な電子デバイス、効率的なエネルギー変換システム、高度な触媒などに向けた新材料の需要が高まっています。これらの多くにおいて、材料中の電荷キャリア（電子や正孔）の移動度は極めて重要な性能指標となります。しかし、高移動度材料の発見は、広大な材料空間の探索と、第一原理計算の高コスト性、そして合成の難しさから、依然として大きな課題です。従来の材料探索は、多大な計算資源と時間を要し、多くの場合、試行錯誤に頼っていました。InvDesMobilityは、AIと第一原理計算をインテリジェントに組み合わせることで、このボトルネックを解消し、より迅速かつ体系的な材料発見を可能にします。

## 今後の展望

InvDesMobilityのようなフレームワークは、材料科学における発見のパラダイムを変革する可能性を秘めています。今後、このアプローチは、キャリア移動度だけでなく、熱伝導率、光学特性、機械的特性など、他の重要な材料特性の逆設計にも応用されることが期待されます。また、実験室における自律的な合成ロボットシステムとの統合が進むことで、AIが設計した材料を実際に合成し、その性能を評価する完全なクローズドループシステムが実現する可能性もあります。これにより、次世代半導体、高性能バッテリー、革新的なセンサー、効率的な触媒など、様々な分野での技術革新が加速し、持続可能な社会の実現に大きく貢献するでしょう。材料研究の効率化は、イノベーションの速度を決定づける鍵となります。

元記事: <https://arxiv.org/abs/2606.16133>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# アルゴンヌ国立研究所、ISC High Performance 2026で材料・分子発見加速のためのAIとHPC統合研究を発表

公開日 2026年06月11日 Argonne National Laboratory アメリカ



## 概要

アメリカのアルゴンヌ国立研究所は、ISC High Performance 2026において、人工知能（AI）、高性能コンピューティング（HPC）、量子コンピューティングを統合し、材料および分子の発見を加速させる研究成果を発表しました。これには、特に材料・分子発見のためのエージェントAIワークフローや、HPCとAIを量子化学と連携させる議論が含まれます。この取り組みは、従来の計算手法の限界を打ち破り、新材料や新薬の開発期間を大幅に短縮し、コストを削減する可能性を秘めています。次世代の科学的ブレークスルーを推進するための重要なステップです。

## 詳細

### 主要成果

アメリカのアルゴンヌ国立研究所は、ISC High Performance 2026において、人工知能（AI）、高性能コンピューティング（HPC）、量子コンピューティングを戦略的に統合することで、材料および分子発見を劇的に加速する最新の研究成果を発表しました。この発表は、特にエージェントAIワークフローの効率性と、量子化学計算とHPCおよびAIの連携による新たな科学的発見の可能性を強調しています。

### 技術・臨床詳細

アルゴンヌ国立研究所の研究者たちは、エージェントAIワークフローを開発しました。これは、AIエージェントが自律的に科学的仮説を立て、シミュレーションを実行し、データを分析し、次の実験または計算ステップを計画するシステムです。このワークフローは、複雑な材料設計空間や分子構造空間を効率的に探索することを可能にします。さらに、彼らの研究は、HPCの膨大な計算能力とAIのパターン認識および予測能力を、量子化学計算と統合する方法に焦点を当てています。例えば、第一原理計算によって生成された量子化学データをAIモデルが学習し、より高速かつ高精度な分子動力学シミュレーションや材料特性予測を実現します。これにより、従来の数年単位を要する材料開発サイクルを数ヶ月に短縮できる可能性があり、新薬候補のスクリーニングや機能性材料の最適化に応用されます。

### 背景・業界文脈

材料科学と分子化学の分野では、新しい化合物や材料の発見が、医薬品、エネルギー、電子機器、環境技術など、多くの産業においてイノベーションの原動力となっています。しかし、これらの発見プロセスは、膨大な実験の試行錯誤や、計算負荷の高いシミュレーションに依存しており、非常に時間とコストがかかります。HPCは大規模なシミュレーションを可能にしますが、設計空間の探索は依然としてボトルネックです。AIは、データからパターンを学習し、予測を行うことで、この探索プロセスを効率化します。アルゴンヌ国立研究所の取り組みは、これら三つの技術（AI、HPC、量子）の強みを組み合わせることで、科学的発見の限界を押し広げ、特に量子コンピューティングの発展を見据えた次世代の研究基盤を構築することを目指しています。

## 今後の展望

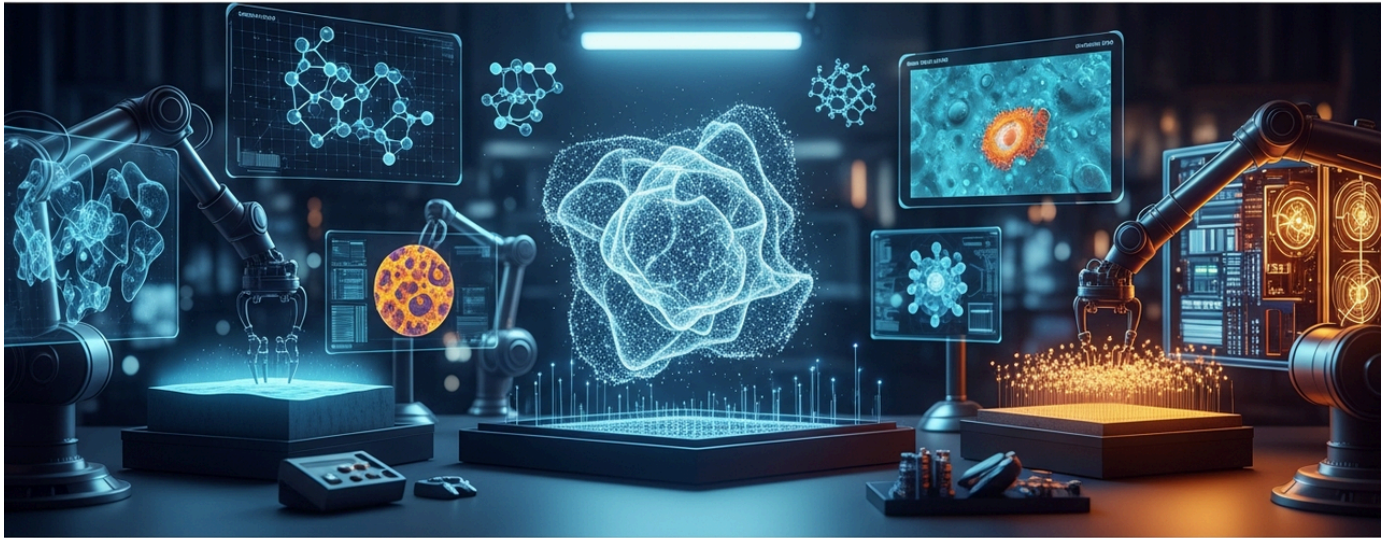
アルゴンヌ国立研究所が推進するAI、HPC、量子技術の統合は、材料科学と分子科学の未来を形作る上で極めて重要です。このアプローチは、新材料や新分子の発見速度を飛躍的に向上させるだけでなく、その設計と最適化のプロセスにおける効率性を根本的に変えるでしょう。将来的には、この統合されたプラットフォームが、自己学習型の自律的な発見システムへと進化し、人間が設定した目標に基づいて、自ら実験計画を立て、実行し、学習する「マテリアルズ・ファクトリー」のようなものが実現するかもしれません。これにより、気候変動対策のための新しい触媒、難病治療薬、高性能バッテリーなど、社会が直面する最も喫緊の課題を解決するための革新的なソリューションが、これまで想像もできなかった速さで生まれることが期待されます。

元記事: <https://www.anl.gov/cels/article/argonne-at-isc-2026>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# 腐食科学の世界モデル構築へ：DeepMindのGNoME、MatterGenが生成AI材料モデルを推進

公開日 2026年06月15日 ResearchGate 国際



## 概要

腐食科学分野で「世界モデル」を構築する研究が活発化しており、腐食固有の特性を条件とする生成材料モデルの必要性が強調されています。DeepMindのGNoMEやMatterGenといった既存の生成AIモデルは、すでに安定な無機材料を生成し、多様な特性制約に合わせて微調整できる能力を示しています。このアプローチは、材料の腐食挙動を予測し、耐食性材料を設計するための新たな道を開くものであり、産業インフラの安全性と寿命向上に大きく貢献する可能性を秘めています。AIが複雑な材料科学の課題解決に貢献する期待が高まっています。

## 詳細

### 主要成果

腐食科学分野における「ワールドモデル」の構築に向けた研究が進行しており、腐食固有の環境条件やメカニズムを考慮した生成材料モデルの必要性が強く提唱されています。DeepMindが開発したGNoME（Graph Networks for Materials Exploration）やMatterGenといった既存の生成AIモデルは、安定な無機材料の生成において既にその能力を証明しており、これらのモデルが腐食特性に関する制約に基づいて微調整されることで、耐食性材料の設計に革命をもたらす可能性が示されています。

### 技術・臨床詳細

「腐食科学のためのワールドモデル」とは、材料が様々な環境下でどのように腐食するかを包括的に理解し、予測し、そして最適な耐食性材料を設計するためのAIベースの統合フレームワークを指します。GNoMEやMatterGenのような生成AIモデルは、大規模な材料データベースから結晶構造のパターンと安定性を学習し、これまでに知られていない新しい安定な材料を生成できます。これらのモデルを腐食科学に応用する際には、腐食環境のパラメータ（例：pH、温度、塩濃度、酸化還元電位）や材料の微細構造、組成といった腐食に特化した情報がモデルの条件として追加されます。これにより、AIは特定の環境下で優れた耐食性を示す可能性のある材料を設計できるようになります。例えば、海洋環境や高温高圧環境下での金属の腐食挙動を予測し、その環境に耐えうる合金組成やコーティング材料の候補を生成することが可能になります。

### 背景・業界文脈

腐食は、産業インフラ、輸送システム、エネルギー設備、医療機器など、あらゆる分野で深刻な経済的損失と安全上のリスクを引き起こしています。世界経済において年間数兆ドル規模の損失が発生していると推定されており、その対策は喫緊の課題です。従来の耐食性材料の開発は、試行錯誤の実験や経験則に大きく依存しており、時間とコストがかかり非効率的でした。第一原理計算などの理論的手法も用いられますが、腐食の複雑な多スケール現象を完全にモデル化することは困難です。生成AIを腐食科学に応用することは、この伝統的なボトルネックを解消し、より迅速かつ効果的に耐食性材料を設計するための新しいパラダイムを提供するものとして期待されています。

## 今後の展望

腐食科学における生成AI「ワールドモデル」の実現は、材料の設計と寿命予測に革命をもたらすでしょう。今後は、GNoMEやMatterGenといったモデルが、より複雑な腐食メカニズム（応力腐食割れ、孔食、疲労腐食など）や、多成分系の相互作用をモデル化する能力を強化することが期待されます。また、AIが予測した材料を自律的に合成・評価する実験ロボティクスとの連携も進むことで、完全に自動化された「腐食耐性材料ファクトリー」のようなシステムが実現する可能性もあります。これにより、インフラの長寿命化、メンテナンスコストの削減、資源の効率的な利用、そして環境負荷の低減に貢献し、持続可能な社会の実現に不可欠な技術となるでしょう。

元記事: #

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# 科学生成言語モデルLOGOS、自然科学の異種タスクを単一フレームワークで統合し高精度を達成

公開日 2026年06月16日 arXiv 国際



## 概要

自然科学全般にわたる異種タスクを単一の自己回帰フレームワークで統合する科学生成言語モデル「LOGOS」が発表されました。LOGOSは、多様な科学的オブジェクトとその三次元相互作用を共通の科学的文法に基づいてトークンシーケンスとして符号化し、ドメイン固有のベースラインと同等またはそれ以上の性能を発揮します。この画期的なアプローチは、化学、物理学、材料科学といった異なる科学分野間の知識統合を促進し、これまで分断されていた研究領域の橋渡しを可能にします。これにより、科学的発見のプロセスが大幅に加速されると期待されます。

## 詳細

### 主要成果

自然科学全般にわたる異種タスクを単一の自己回帰フレームワークで統合する、汎用性の高い科学生成言語モデル「LOGOS」が開発されました。LOGOSは、多様な科学的オブジェクト（原子、分子、結晶、反応など）とその三次元相互作用を共通の科学的文法に基づいてトークンシーケンスとして符号化し、それぞれのドメイン固有のベースラインモデルと同等またはそれ以上の高い性能を達成することを実証しました。

### 技術・臨床詳細

LOGOSモデルの核心は、自然科学におけるあらゆる種類の情報を、標準化された「科学的文法」に基づくトークンシーケンスとして表現する能力にあります。これにより、分子構造、反応経路、結晶格子、物理シミュレーション結果など、異種データが単一のモデルで処理可能になります。例えば、原子座標、元素の種類、結合情報といった3D構造データは、グラフニューラルネットワーク（GNN）やトランスフォーマーのようなアーキテクチャを通じて、テキスト形式のトークンシーケンスに変換されます。モデルは、このトークンシーケンスを自己回帰的に学習し、新しい科学的オブジェクトの生成、特定の特性を持つ材料の予測、実験結果の解釈など、多岐にわたるタスクを実行します。この汎用性により、個々のドメインに特化した複数のAIモデルを開発する必要がなくなり、科学研究におけるAI導入の障壁が大幅に低減されます。

### 背景・業界文脈

現代の科学研究は、物理学、化学、材料科学、生物学といった異なる専門分野に深く分化しており、それぞれの分野で独自のデータ形式、モデル、専門用語が発展してきました。この専門分野間の分断は、知識の統合や分野横断的なイノベーションを妨げる大きな課題となっていました。一方で、大規模言語モデル（LLM）は、テキストデータを基盤として人間のような言語理解と生成能力を示しており、この知見を科学分野に応用しようとする動きが加速しています。LOGOSは、この動きの最先端をいくものであり、科学データに対する共通の「言語」を提供することで、異なる科学分野の研究者がAIを活用して協調し、より複雑な科学的課題を解決するための強力なプラットフォームとなります。

## 今後の展望

LOGOSのような汎用科学生成言語モデルは、科学的発見の未来を大きく変革する可能性を秘めています。今後、LOGOSは、より大規模な科学データセットで訓練され、その理解と生成能力がさらに向上することが期待されます。これにより、新たな触媒の設計、未知の物理現象の予測、合成が困難な分子の経路探索、さらには科学論文の自動生成や研究計画の立案まで、多岐にわたる応用が可能になるでしょう。最終的には、LOGOSが科学的知識の統合ハブとなり、人間とAIが協力して未踏の科学的フロンティアを開拓する「AI駆動型科学」の新たな時代を到来させることが期待されます。これは、医薬品開発、エネルギー、環境問題解決など、社会が直面する最も重要な課題に対する解決策を加速する上で不可欠な技術となるでしょう。

元記事: <https://arxiv.org/html/2606.16905v1>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# ACS論文、オスマベンゼン錯体の構造特性予測に化学情報駆動型MLフレームワークを導入し高精度を実現

公開日 2026年06月11日 ACS Publications 国際



## 概要

ACS Publicationsに掲載された研究は、オスマベンゼン錯体の構造的な非平面性を予測するための、化学情報駆動型機械学習（ML）フレームワークを開発しました。軌道エネルギーに基づく記述子を用いることで、このフレームワークは高い予測精度を達成し、調整可能な構造特性を持つ遷移金属ベースの芳香族化合物の合理的設計の基盤を提供します。このブレークスルーは、新機能性材料、特に有機金属錯体の設計と最適化のプロセスを加速し、医薬品、触媒、電子材料など多岐にわたる分野での応用が期待されます。

### 主要成果

ACS Publicationsに掲載された新たな研究において、オスマベンゼン錯体の構造的な非平面性を高い精度で予測するための、化学情報駆動型機械学習（ML）フレームワークが開発されました。このフレームワークは、軌道エネルギーに基づく独自の記述子を活用することで、遷移金属ベースの芳香族化合物の構造特性を合理的に設計するための強固な基盤を確立します。

### 技術・臨床詳細

開発されたMLフレームワークは、密度汎関数理論（DFT）計算から得られる軌道エネルギー（例：最高被占軌道HOMO、最低空軌道LUMO）などの量子化学的情報から抽出された記述子を特徴量として用います。これにより、分子の電子状態を直接反映した情報を学習することが可能となり、オスマベンゼン錯体の中心金属原子であるオスミウムとその配位子環の相対的な「非平面性」という構造特性を高い精度で予測します。非平面性は、これらの錯体の光学的、電子的特性に大きく影響するため、その正確な予測は機能性材料設計において極めて重要です。本研究では、従来の純粋な幾何学的記述子に加えて、化学的背景に基づいた電子構造記述子を組み込むことで、予測モデルの汎化能力と解釈可能性が向上することが示されました。これにより、特定の非平面性を持つオスマベンゼン錯体を「逆設計」するための効率的なルートが提供されます。

### 背景・業界文脈

有機金属錯体、特に遷移金属ベースの芳香族化合物は、その多様な構造と調整可能な特性から、触媒、医薬品、有機発光ダイオード（OLED）、太陽電池などの分野で大きな注目を集めています。オスマベンゼン錯体は、オスミウム原子がベンゼン環に配位した構造を持ち、ユニークな電子特性と化学的安定性を示すことで知られています。しかし、これらの錯体の合成と特性評価は複雑であり、望ましい機能を持つ分子を効率的に設計することは長年の課題でした。化学的直感と試行錯誤に頼る従来の設計プロセスは、時間とコストがかかり非効率的です。機械学習を化学情報と組み合わせるアプローチは、このボトルネックを解消し、より体系的かつ合理的な分子設計を可能にすることで、高性能な有機金属材料の開発を加速させます。

## 今後の展望

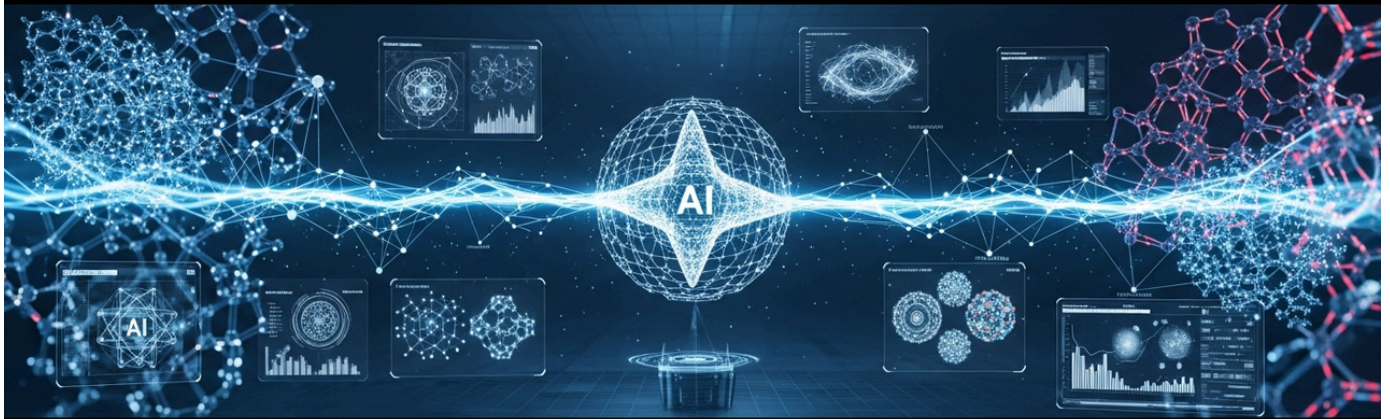
この化学情報駆動型MLフレームワークは、オスマベンゼン錯体だけでなく、他の遷移金属有機錯体や機能性分子全般の設計に広く応用される可能性を秘めています。今後は、より複雑な分子システムや動的な構造変化（反応経路など）の予測に拡張され、さらには実験ロボティクスとの統合による自律的な分子発見プラットフォームの中核を担うことが期待されます。これにより、創薬分野におけるリード化合物の迅速な特定、高効率な触媒の設計、次世代の電子材料や光電材料の開発が加速されるでしょう。AIと量子化学の融合は、分子科学と材料科学におけるイノベーションの速度を根本的に変え、社会が直面する重要な技術的課題の解決に大きく貢献すると予測されます。

元記事: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcllett.6c00890>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# Tech Science Press誌、AI・ML・生成モデルによる材料科学のパラダイム進化を特集

公開日 2026年06月15日 Tech Science Press 国際



## 概要

Tech Science Pressのジャーナル『CMC』2026年第88巻第2号が、AI、機械学習、生成モデルが材料科学の科学的パラダイムをどのように進化させているかを特集しました。本号には、フェデレーテッドLLMエコシステムに関する調査や、材料データの収集、前処理、モデル開発のための機械学習フレームワークを概説する記事が含まれます。この特集は、材料科学分野におけるAIの統合が、新材料の発見、設計、最適化を加速する上で不可欠であることを強調しており、研究者やエンジニアに最新の知見と実践的なアプローチを提供します。今後の材料研究の方向性を示す重要な指針となるでしょう。

## 詳細

### 主要成果

Tech Science Pressのジャーナル『CMC』2026年第88巻第2号は、AI、機械学習（ML）、および生成モデルが材料科学の科学的パラダイムを根本的に変革している現状に焦点を当てた特集号です。本号では、材料データ処理からモデル開発に至る機械学習フレームワークの進化と、特にフェデレーテッド大規模言語モデル（LLM）エコシステムが材料発見にもたらす影響が詳細に議論されています。

### 技術・臨床詳細

この特集号の記事では、材料科学における機械学習のライフサイクル全体が概説されています。これには、多様な実験データや計算データ（第一原理計算、分子動力学シミュレーションなど）の収集、データの前処理と標準化、特徴量エンジニアリング、そして様々なMLモデル（回帰モデル、分類モデル、深層学習モデルなど）の構築と評価が含まれます。特に注目されるのは、材料データの希少性やノイズに対処するためのデータ効率的な学習手法、および生成モデル（生成敵対ネットワークGANs、変分オートエンコーダVAEs、拡散モデルなど）を用いた新規材料構造の設計能力です。また、フェデレーテッドLLMエコシステムに関する調査では、分散されたデータソースからLLMが協調的に学習し、材料科学の特定のサブドメインにおける知識共有とモデル改善を促進する方法が分析されています。これにより、プライバシーを保護しつつ、より大規模なデータセットから学習する機会が提供されます。

### 背景・業界文脈

材料科学は、医薬品、エネルギー、エレクトロニクス、建設など、あらゆる産業の基盤を支える分野です。しかし、新材料の発見と開発は、伝統的に膨大な実験と計算の試行錯誤を要する、時間とコストのかかるプロセスでした。AI、ML、生成モデルの導入は、この状況を劇的に変える可能性を秘めています。データ駆動型アプローチにより、研究者は材料の構造と特性の複雑な関係をより深く理解し、望ましい機能を持つ材料をより迅速かつ効率的に設計できるようになりました。このパラダイムシフトは、材料開発のボトルネックを解消し、イノベーションの速度を飛躍的に向上させるものとして、学术界および産業界から大きな期待が寄せられています。

## 今後の展望

この特集号が示すように、材料科学におけるAIの役割は今後さらに拡大するでしょう。将来的には、AI、ML、生成モデルは、材料の「設計-合成-特性評価-応用」というクロースドループの自動化された発見サイクルの中核を担うことが期待されます。フェデレーテッドLLMエコシステムのような分散型AIアプローチは、異なる研究機関や企業間での知識共有と共同研究を促進し、より大規模なデータから集団的に学習することを可能にするでしょう。これにより、AI駆動型の自律的な材料発見プラットフォームが普及し、持続可能なエネルギー、環境技術、高度な医療材料など、社会が直面する最も喫緊の課題を解決するための画期的な新材料が、これまで想像もできなかった速さで創出されることが予測されます。

元記事: <https://www.techscience.com/cmc/v88n2>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# XRDiff、拡散モデルを活用し粉末X線回折データから結晶構造を予測する新手法

公開日 2026年06月12日 arXiv 国際



## 概要

新しい拡散モデル「XRDiff」が開発され、粉末X線回折（PXRD）データから結晶構造を予測することを可能にしました。XRDiffは、部分的な化学組成入力でも機能し、スペクトルから構造へのマッピングを学習することで、多形体を区別できるほど正確です。この技術は、実験とシミュレーションのギャップを埋め、結晶構造解析における実用的でスケーラブルな道筋を提供します。特に、医薬品、触媒、バッテリー材料など、新材料開発における構造決定の高速化と精度向上に大きく貢献する可能性を秘めています。

## 詳細

### 主要成果

拡散モデルを用いた新しい手法「XRDiff」が開発され、粉末X線回折（PXRD）データから結晶構造を予測する能力が実証されました。XRDiffは、部分的な化学組成情報のみを頼りに、PXRDスペクトルと材料の3D原子配置の複雑なマッピングを学習し、高い精度で多形体を区別できるほどの性能を示します。これは、結晶構造解析におけるシミュレーションと実験の間の長年のギャップを埋める、実用的でスケーラブルなアプローチを提供します。

### 技術・臨床詳細

XRDiffは、生成AIの一種である拡散モデルの原理を応用しています。このモデルは、ランダムなノイズから開始し、PXRDスペクトルという条件付き情報を手掛かりに、繰り返しノイズを除去することで最終的な結晶構造（原子座標、格子パラメータ、空間群など）を生成します。モデルは、PXRDスペクトルが異なる結晶構造間でどのように変化するかを学習し、その逆問題を解決します。例えば、異なる結晶形（多形体）を持つ医薬品原体のPXRDパターンは非常に類似していることがありますが、XRDiffはこれらの微妙な違いを捉え、正確な構造を識別することが可能です。この「スペクトルから構造へ」のマッピング能力は、従来の直接法やモンテカルロ法などの手法と比較して、計算コストを抑えつつ、より網羅的な構造探索と高精度な予測を可能にします。

### 背景・業界文脈

結晶構造の決定は、医薬品、機能性材料、触媒、セメント、地質学など、多岐にわたる科学技術分野において基礎的かつ不可欠な情報です。特に、新規材料の探索や既存材料の最適化において、正確な結晶構造は材料の物性（硬度、溶解度、電子特性など）を理解し制御する上で鍵となります。しかし、単結晶が得られない微結晶性の材料や、複雑な多成分系の場合、粉末X線回折は最も一般的な分析手法である一方で、そのデータから結晶構造を直接決定する「粉末回折法による構造決定（Rietveld解析など）」は、しばしば困難で時間がかかる作業です。XRDiffのようなAI駆動型の手法は、このボトルネックを解消し、より迅速かつロバストな構造決定プロセスを提供することで、材料開発のサイクルを大幅に短縮する可能性を秘めています。

## 今後の展望

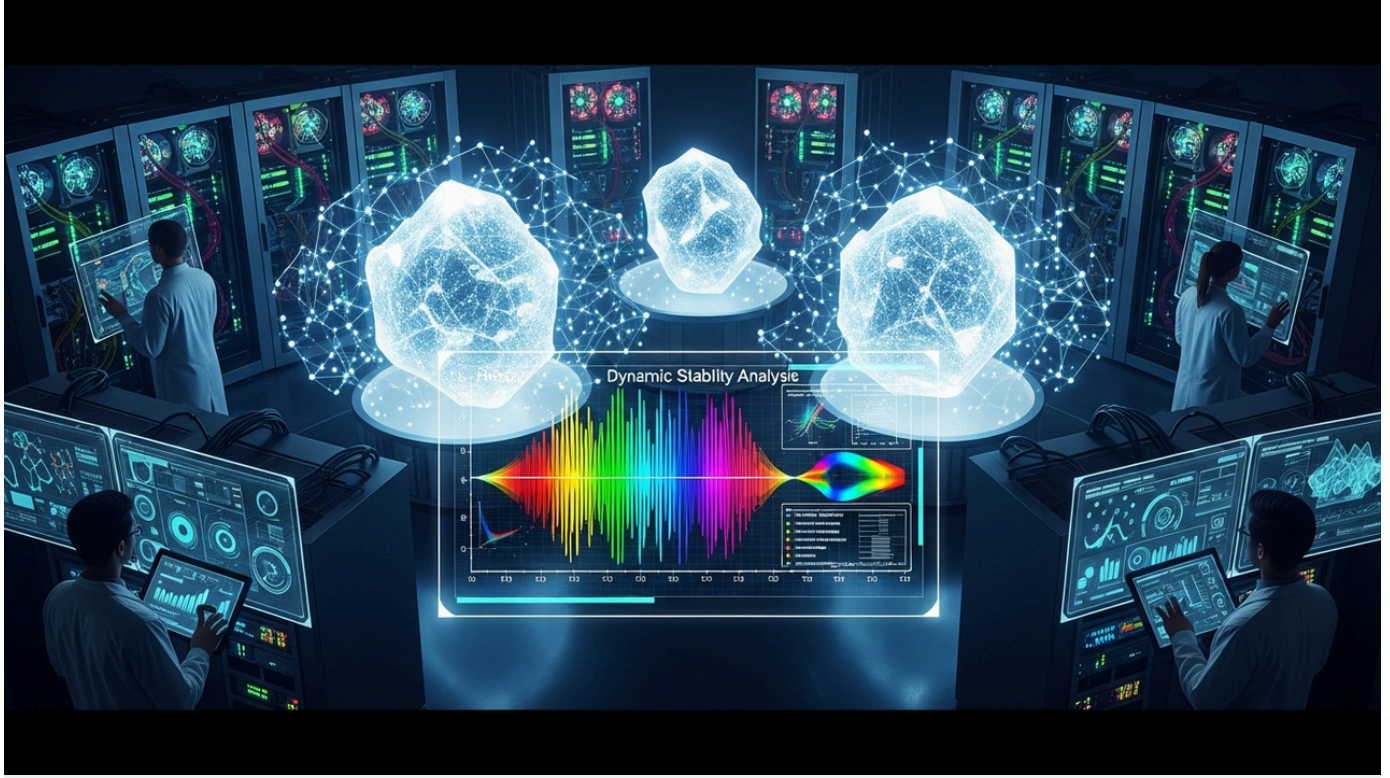
XRDiffの開発は、材料科学におけるデータ駆動型発見の新たなフロンティアを切り開きます。今後、この拡散モデルベースのアプローチは、より複雑な欠陥構造、アモルファス材料、多成分系材料の構造解析にも拡張されることが期待されます。また、PXRDだけでなく、中性子回折や電子回折データなど、他の回折技術との統合も進むでしょう。最終的には、XRDiffが材料研究室におけるルーティンワークの一部となり、自律的な材料発見プラットフォームに組み込まれることで、医薬品の品質管理、高性能バッテリー材料の最適化、新しい触媒設計など、広範な産業応用においてイノベーションを加速させることが予測されます。これにより、材料科学の実験と理論のギャップがさらに縮まり、研究の効率性が飛躍的に向上するでしょう。

元記事: <https://arxiv.org/abs/2606.14003>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# PhononBench、AI結晶生成モデルの動的安定性を評価する大規模ベンチマークを公開

公開日 2026年06月12日 arXiv 国際



## 概要

AIモデルによって生成された結晶構造の動的安定性を評価するための大規模なベンチマーク「PhononBench」が発表されました。PhononBenchは、DeepMindのMatterGenのような現在の結晶生成モデルが安定な構造を生成する際の限界を浮き彫りにし、物理的に実行可能な材料の将来の開発のための重要な評価基準を提供します。このベンチマークの導入により、AIを用いた新材料探索における信頼性と実用性が向上し、材料科学分野でのAI応用を加速するための基礎が築かれます。これにより、理論上の材料だけでなく、実際に合成可能で安定な材料の発見が促進されるでしょう。

## 詳細

### 主要成果

AIモデルによって生成された結晶構造の動的安定性を系統的に評価するための、大規模なフォノンベースのベンチマーク「PhononBench」が発表されました。このベンチマークは、DeepMindのMatterGenのような最先端の結晶生成モデルが、物理的に安定な構造を生成する能力において依然として課題を抱えていることを明確に示し、将来の物理的に実行可能な新材料開発のための重要な評価基準を提供します。

### 技術・臨床詳細

PhononBenchは、結晶のフォノン分散関係を計算し、その結果から動的安定性を評価します。結晶が動的に安定であるためには、フォノン分散曲線に虚数周波数（不安定な振動モード）が含まれていない必要があります。ベンチマークは、MatterGenを含む複数の生成モデルによって提案された数千の結晶構造に対してこの解析を適用し、それぞれの構造が安定か不安定かを判定します。例えば、MatterGenは新規の結晶構造を生成する能力は高いものの、PhononBenchによる評価では、生成された構造の多くが動的に不安定である（つまり、現実世界では存在しにくい）ことが明らかになりました。この結果は、AIによる材料設計が、単に構造を生成するだけでなく、その物理的実現可能性、特に熱力学的・動的安定性を厳密に考慮する必要があることを強調しています。PhononBenchは、この課題を定量的に評価するための標準的なツールを提供し、より物理学に根ざしたAIモデルの開発を促します。

### 背景・業界文脈

AI、特に生成モデルは、新材料の発見と設計において大きな期待を集めています。DeepMindのGNoMEやMatterGenのようなモデルは、これまで知られていなかった多数の安定な材料を予測できるとされていますが、これらのモデルが生成する「安定」とは、主に熱力学的安定性（他の既知の化合物と比較してエネルギー的に低い状態）を指すことが多いです。しかし、材料が実際に存在し、機能するためには、熱力学的安定性だけでなく、動的安定性（格子振動によって崩壊しないこと）も不可欠です。動的安定性の欠如は、材料が合成されたとしてもすぐに構造が崩れてしまうことを意味します。PhononBenchは、この重要な側面を見落とさないように、AI生成材料の「現実世界での実現可能性」を評価するためのギャップを埋めるものです。

## 今後の展望

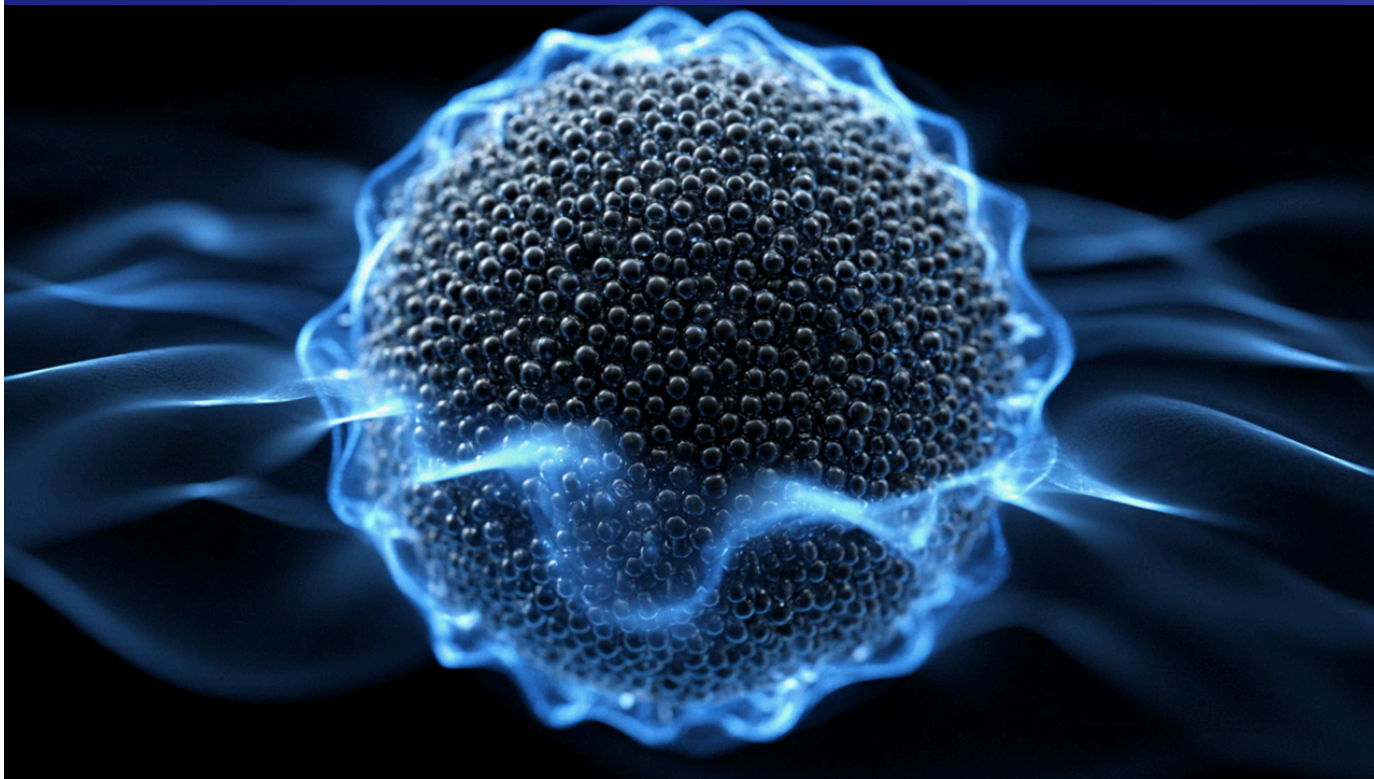
PhononBenchの導入は、AI駆動型の材料発見研究における重要なマイルストーンとなります。今後、結晶生成モデルはPhononBenchのようなベンチマークを活用して、動的安定性をより高く保証できるようなアーキテクチャや訓練方法を開発することが求められるでしょう。これにより、AIが提案する新材料の信頼性が向上し、実際に合成され、実用化される可能性が高まります。将来的には、AIが単に安定な構造を予測するだけでなく、特定の機能（例：超伝導性、熱電性能）を持ち、かつ動的にも安定な材料を自律的に設計できるようになることが期待されます。これは、材料科学研究の効率を飛躍的に向上させ、より高性能で持続可能な新材料の開発を加速し、医薬品、エネルギー、エレクトロニクスなどの分野に大きな影響をもたらすでしょう。

元記事: <https://arxiv.org/html/2512.21227v3>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# ブラウン大学とミシガン大学、金属の未発見中間相物質を安定化させ量子コンピューティングへ新たな洞察

公開日 2026年06月11日 SciTechDaily アメリカ



## 概要

ブラウン大学とミシガン大学の研究者らが、金属の一般的な2つの結晶配置間に存在する、これまで捉えられていなかった中間相の物質を安定化させることに成功しました。この数十年にわたる予測が遂に現実のものとなった発見は、Science誌に発表され、材料の構造変化に関する新たな洞察を提供し、量子コンピューティングに関連する光学特性の理解を深めます。この中間相の安定化は、材料の基本的な挙動に対する理解を深めるとともに、新機能を持つ材料設計に新たな可能性をもたらすものです。

## 詳細

### 主要成果

ブラウン大学とミシガン大学の研究者チームが、金属材料において数十年間予測されてきたものの、これまで実験的に捉えられていなかった「隠れた中間相」の物質を初めて安定化させることに成功しました。この画期的な発見は、金属の二つの主要な結晶構造（体心立方格子BCCと面心立方格子FCC）の間に存在する、これまでアクセス困難だった新たな構造状態への道を開き、材料の構造変化に関する基礎的な理解を深めます。

### 技術・臨床詳細

研究チームは、特殊な実験条件下でニオブ-チタン合金を処理することにより、この隠れた中間相を安定化させました。この中間相は、BCCとFCCの間で原子が再配列する過程で一時的に生じる構造ですが、通常は不安定で短寿命であるため、その存在を直接観測し、特性を評価することは困難でした。彼らは、詳細なX線回折、透過型電子顕微鏡、および密度汎関数理論（DFT）計算を組み合わせることで、この中間相の原子配列と電子状態を精密に特定しました。この安定化された中間相は、ユニークな光学特性を示すことが明らかになり、特に量子コンピューティングにおける超伝導体やトポロジカル材料の挙動に関連する新たな洞察を提供します。この構造が安定化されたことで、その特性を詳細に調査し、潜在的な応用を探索することが可能になりました。

### 背景・業界文脈

材料科学において、結晶構造の相転移は材料の物性（強度、導電性、磁性など）を劇的に変化させるため、その制御と理解は極めて重要です。特に金属は、外部からの熱や応力によって結晶構造が変化することが知られており、これが材料の加工性や最終製品の性能に影響を与えます。過去数十年にわたり、理論物理学者たちは特定の金属合金がBCCとFCCの間で不安定な中間相を持つことを予測してきましたが、実験的観測はほとんどありませんでした。この中間相の発見と安定化は、材料の相転移ダイナミクスに関する従来の理解を拡張し、材料設計の新たなフロンティアを開拓するものです。量子コンピューティング分野では、新しい超伝導材料や量子ビット材料の探索が活発に行われており、基礎的な材料物理学の進展は直接的なブレークスルーにつながります。

## 今後の展望

この隠れた中間相の安定化は、材料科学および量子物理学に広範な影響をもたらすでしょう。今後、研究者たちはこの中間相の特性をさらに深く探求し、量子コンピューティングの分野における新しい応用（例：高 $T_c$ 超伝導体やより安定な量子ビット）の可能性を追求するでしょう。この発見はまた、材料の相転移を制御するための新しい戦略を開発するインスピレーションを与え、設計可能な機能性材料の範囲を拡大します。将来的には、この中間相を基盤とした、これまで不可能だった特性を持つ新材料の開発が期待され、エネルギー、エレクトロニクス、航空宇宙など、多岐にわたる産業分野での革新を加速させることが予測されます。基礎科学のブレークスルーが、応用技術の飛躍的な進歩へと繋がる典型例となるでしょう。

元記事: <https://scitechdaily.com/hidden-phase-of-matter-finally-captured-after-decades-of-predictions/>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# MDPIのレビュー、製薬化学におけるML駆動型分子設計と構造-特性-性能関係の統合フレームワークを提唱

公開日 2026年06月19日 MDPI 国際



## 概要

MDPIに掲載されたレビュー論文は、製薬化学における機械学習（ML）の役割を深く考察し、分子設計、合成の実現可能性、そして構造-特性-性能（SPP）関係を統合するフレームワークを提案しました。このレビューは、分子基盤モデルや拡散ベースの分子生成といった最先端の進展を議論しており、MLが創薬プロセスを根本的に変革する可能性を強調しています。特に、SPP関係を体系的に理解することで、新薬候補の設計から最適化、さらに合成までを効率化し、開発期間とコストを大幅に削減することが期待されます。

## 詳細

### 主要成果

MDPIに掲載された包括的なレビュー論文は、製薬化学分野における機械学習（ML）の役割を詳細に分析し、分子設計、合成の実現可能性、および構造-特性-性能（SPP）関係を統合する新しいフレームワークを提唱しました。このフレームワークは、分子基盤モデルや拡散ベースの分子生成といった最新のML技術を活用し、創薬プロセス全体を効率化する可能性を秘めています。

### 技術・臨床詳細

提案された統合SPPフレームワークは、分子の構造（S）、その物理化学的特性（P、例：溶解度、代謝安定性）、そして最終的な生物学的性能（P、例：薬効、毒性）の関係をMLモデルを用いて体系的にマッピングすることを目指します。レビューでは、特に拡散モデルなどの生成AIが、特定の薬理活性を持つ新規分子を設計する能力に焦点を当てています。これらのモデルは、膨大な化学構造データから学習し、ユーザーが指定する特性に基づいて新たな分子構造を生成します。また、合成の実現可能性を予測するMLモデルも統合され、設計された分子が実際に合成可能であるかを評価することで、開発の失敗リスクを低減します。このクローズドループのアプローチは、従来の分子設計における試行錯誤を減らし、リード化合物の最適化から前臨床段階への移行を加速させます。例えば、特定のターゲットタンパク質に高親和性で結合し、かつ経口吸収性や安全性が高い分子を、MLが効率的に提案することが可能になります。

### 背景・業界文脈

創薬プロセスは、平均で10年から15年という長い期間と、数十億ドルという莫大なコストがかかることで知られています。これは、膨大な数の分子の中から有望な薬候補を特定し、その安全性と有効性を検証する過程が複雑であるためです。特に、初期の分子設計と最適化の段階では、化学的直感や経験に大きく依存し、非効率性が課題でした。機械学習、特に深層学習の進展は、このボトルネックを解消する強力なツールとして注目されています。分子基盤モデル（例えば、Transformerベースのモデル）や生成AIは、分子の設計空間をより効率的に探索し、既存のデータから新たな知見を引き出すことで、創薬研究のパラダイムを変えつつあります。SPP関係の統合は、単一の特性だけでなく、複数の重要な側面を同時に最適化する上で不可欠です。

## 今後の展望

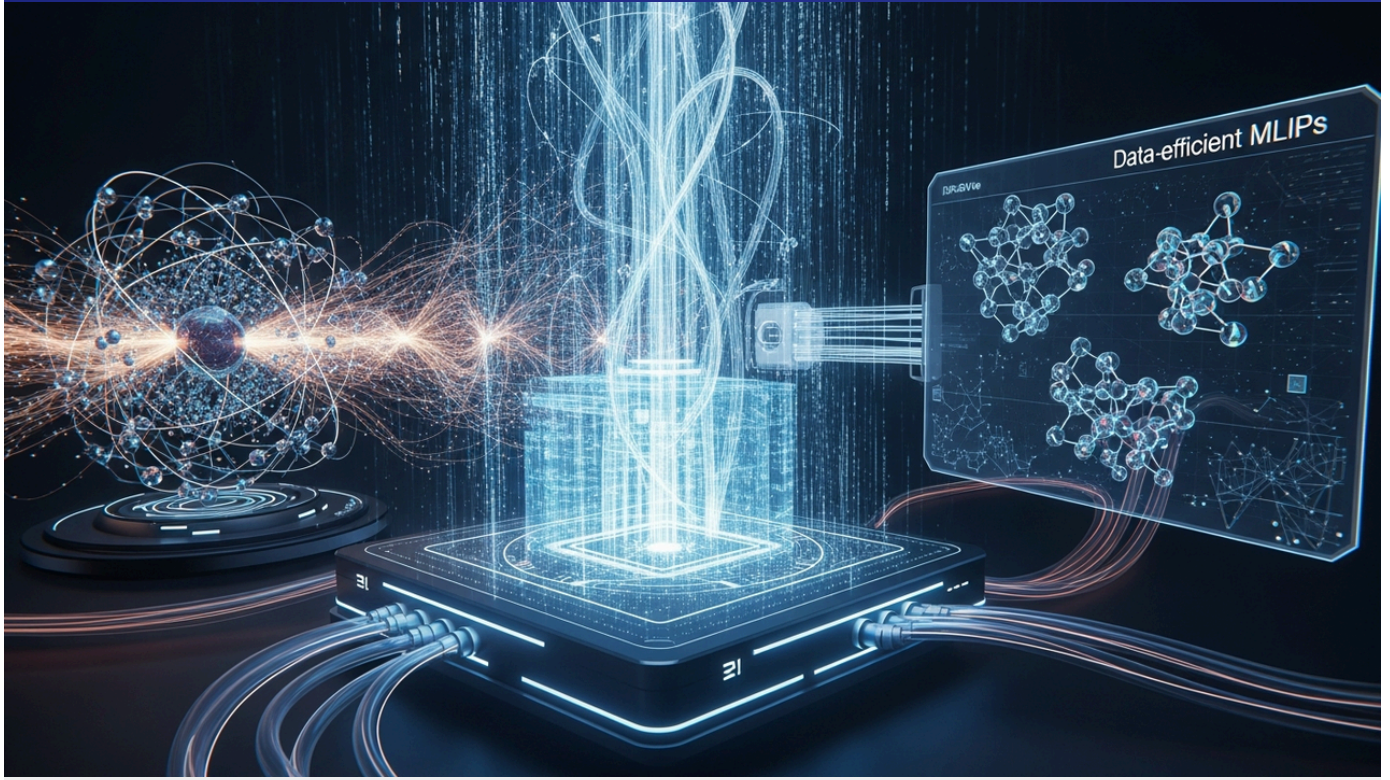
ML駆動型分子設計とSPP関係の統合は、製薬業界に革命をもたらす可能性を秘めています。今後、このフレームワークは、より複雑な疾患ターゲットや多因子疾患の治療薬設計に応用されることが期待されます。また、AIが単に分子を設計するだけでなく、合成経路の最適化、in vitro/in vivo試験のデザイン、さらには臨床試験データの解析までを支援する、より広範なAIプラットフォームへと進化するでしょう。これにより、新薬開発の成功率が向上し、患者への革新的な治療法がより迅速に届けられるようになります。長期的には、AIが創薬プロセス全体の「自動化された発見ファクトリー」の中核を担い、より個別化された医療や、これまで治療が困難だった疾患に対するソリューションの創出に貢献すると予測されます。

元記事: <https://www.mdpi.com/1420-3049/31/12/2162>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# DP-EVAフレームワーク、大規模原子モデルの事前学習済み知識を最大化しデータ効率の高いMLIPsを開発

公開日 2026年06月11日 Clean Energy | Oxford Academic 国際



## 概要

新しいデータ効率の良いファインチューニングフレームワーク「DP-EVA」が導入されました。これは、大規模な原子モデルの事前学習済み知識を最大限に活用し、ドメイン固有の機械学習原子間ポテンシャル（MLIPs）を開発することを可能にします。DP-EVAにより、MLIPsを用いた原子シミュレーションの時間的および空間的スケールを大幅に拡張でき、計算コストを削減しながら、新材料設計や反応メカニズム解析の精度を向上させます。この技術は、クリーンエネルギー材料、触媒、バッテリー材料など、多岐にわたる分野の研究開発を加速する強力なツールとなるでしょう。

## 詳細

### 主要成果

機械学習原子間ポテンシャル (MLIPs) の開発において、大規模原子モデルの事前学習済み知識を最大限に活用する、データ効率の良いファインチューニングフレームワーク「DP-EVA」が発表されました。DP-EVAは、限られたドメイン固有データからでも高性能なMLIPsを迅速に構築することを可能にし、原子シミュレーションの時間的および空間的スケールを大幅に拡張します。

### 技術・臨床詳細

DP-EVA (Data-Efficient Fine-Tuning framework via Maximizing Pre-trained Knowledge of Large Atomistic Models) は、転移学習の原理に基づいています。まず、膨大な数の原子配置とエネルギー、力のデータセット (例: Materials Project、OpenKIM) から、普遍的な物理法則や化学的結合のパターンを学習した大規模な原子モデル (基盤モデル) を用意します。次に、特定のドメイン (例えば、特定の合金系、界面現象、特定の反応) に特化した少量のアブイニシオ計算データや実験データを収集します。DP-EVA は、この少量データを用いて基盤モデルを効率的に「ファインチューニング」することで、ドメイン固有の挙動を高い精度で再現できるMLIPsを生成します。このプロセスは、ゼロからMLIPを訓練するよりもはるかに少ない計算資源と時間で済みます。例えば、特定の触媒反応における活性サイトの挙動や、バッテリー材料のイオン輸送メカニズムなど、複雑な現象を原子レベルで大規模かつ長時間のシミュレーションで解析することが可能になります。

## 背景・業界文脈

原子間ポテンシャルは、分子動力学（MD）シミュレーションにおいて原子間の相互作用を記述するために不可欠なツールです。しかし、従来の経験的ポテンシャルは精度に限界があり、第一原理計算（DFT）は高精度ですが計算コストが高く、大規模なシステムや長時間のシミュレーションには不向きでした。機械学習原子間ポテンシャル（MLIPs）は、DFTの精度と経験的ポテンシャルの計算効率を両立させるものとして注目されています。しかし、高品質なMLIPsを訓練するには、依然として大量のDFTデータセットが必要であり、これがボトルネックとなっていました。DP-EVAのようなデータ効率の高いファインチューニング手法は、この課題を解決し、MLIPsの汎用性と実用性を大幅に向上させるものです。特に、クリーンエネルギー技術（燃料電池、バッテリー、ソーラーセル）や高性能材料開発において、MLIPsは不可欠なツールとなりつつあります。

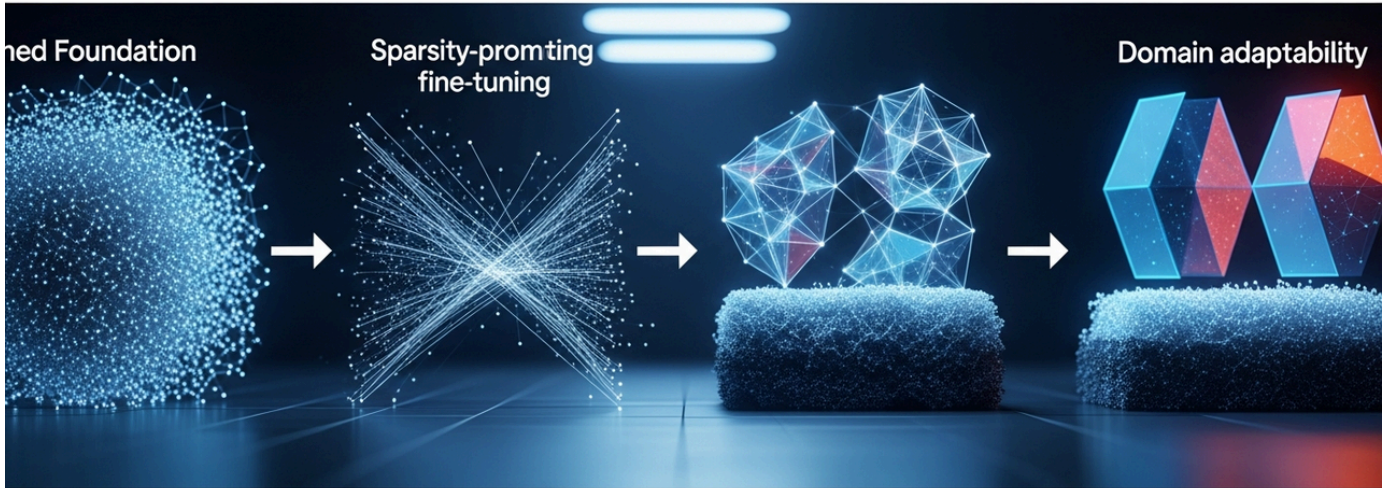
## 今後の展望

DP-EVAフレームワークの登場は、MLIPsの応用範囲を劇的に広げ、原子シミュレーションの新たな時代を切り開くでしょう。今後、この手法は、より複雑な多成分系材料、高温高圧環境下の材料、さらには生物学的分子システムなど、様々な応用分野に展開されることが期待されます。データ効率的なアプローチは、AI駆動型の材料発見プラットフォームにおいて中心的な役割を果たすようになり、研究者がより迅速に革新的な材料を設計・最適化することを可能にします。これにより、エネルギー変換効率の向上、バッテリーの長寿命化、新しい触媒の開発など、社会が直面する最も喫緊の課題を解決するための技術革新が加速されることが予測されます。科学的発見の「時間とコスト」の壁を打ち破る、極めて重要な技術となるでしょう。

元記事: <https://academic.oup.com/ce/advance-article-abstract/doi/10.1093/ce/zkag029/8706613>

# スパース性促進ファインチューニング、事前学習済み等価材料基盤モデルのドメイン適応性を強化

公開日 2026年06月18日 arXiv 国際



## 概要

事前学習済み等価材料基盤モデル（MLIPs）をドメイン固有のアプリケーションに堅牢かつ解釈可能に適応させるための、スパース性促進ファインチューニング手法が提案されました。この手法は、モデルパラメータを選択的に更新することで、フルファインチューニングと同等またはそれ以上の性能を、はるかに少ない更新パラメータで達成します。特に磁気モーメント予測にも適用可能であり、計算コストを大幅に削減しつつ、多様な材料システムにおける高精度な物理特性予測を可能にします。これは、AI駆動型材料設計の効率と実用性を飛躍的に向上させるものです。

## 詳細

### 主要成果

事前学習済み等価材料基盤モデル（Equivariant Materials Foundation Models, MLIPs）をドメイン固有のアプリケーションに堅牢かつ解釈可能に適応させるための、新しいスパース性促進ファインチューニング手法が提案されました。この手法は、モデルの全パラメータを更新することなく、選択された少数のパラメータのみを調整することで、フルファインチューニングと同等またはそれ以上の高い予測性能を、大幅に少ない計算リソースで達成します。特に、磁気モーメント予測のような複雑な物理特性予測においてもその有効性が確認されています。

### 技術・臨床詳細

提案されたスパース性促進ファインチューニングは、モデルの重みの一部のみを更新対象とし、それ以外の大部分の重みは固定する「パラメータ効率の良いファインチューニング（Parameter-Efficient Fine-Tuning, PEFT）」の一種です。具体的には、L1正則化などのスパース性制約をファインチューニングプロセスに導入することで、最も重要なパラメータのみがドメイン固有のデータから学習するように促されます。これにより、モデルが不必要な情報を学習するのを防ぎ、過学習のリスクを低減します。等価性（物理法則に基づく対称性）を保持する材料基盤モデルは、原子の並進、回転、反転などの変換に対して、その予測が適切に変化するという特性を持っています。この特性は、スパース性促進ファインチューニングによっても維持されるため、ファインチューニングされたモデルは物理的に一貫した予測を提供します。この手法は、特定の合金、触媒表面、あるいは磁性材料のクラスなど、限られた量のデータしか利用できないドメインにおいて、既存の基盤モデルを効率的にカスタマイズするのに非常に有効です。

## 背景・業界文脈

近年の材料科学におけるAIの進展は、大規模な事前学習済み基盤モデル（Materials Foundation Models）の登場によって加速されています。これらのモデルは、膨大な第一原理計算データから学習し、様々な材料システムにわたる普遍的な物理法則や化学的相互作用を捉えることができます。しかし、特定のアプリケーション（例えば、特定の欠陥構造を持つ材料のシミュレーションや、特定の温度・圧力条件下での挙動予測）には、これらの汎用モデルをさらに適応させる「ファインチューニング」が必要です。従来のフルファインチューニングは、大量のドメイン固有データと高い計算コストを要するという課題がありました。スパース性促進ファインチューニングは、この課題を解決し、より少ないデータと計算資源で基盤モデルを専門化させる効率的な手段を提供することで、AI駆動型材料設計の実用化を大きく推進します。

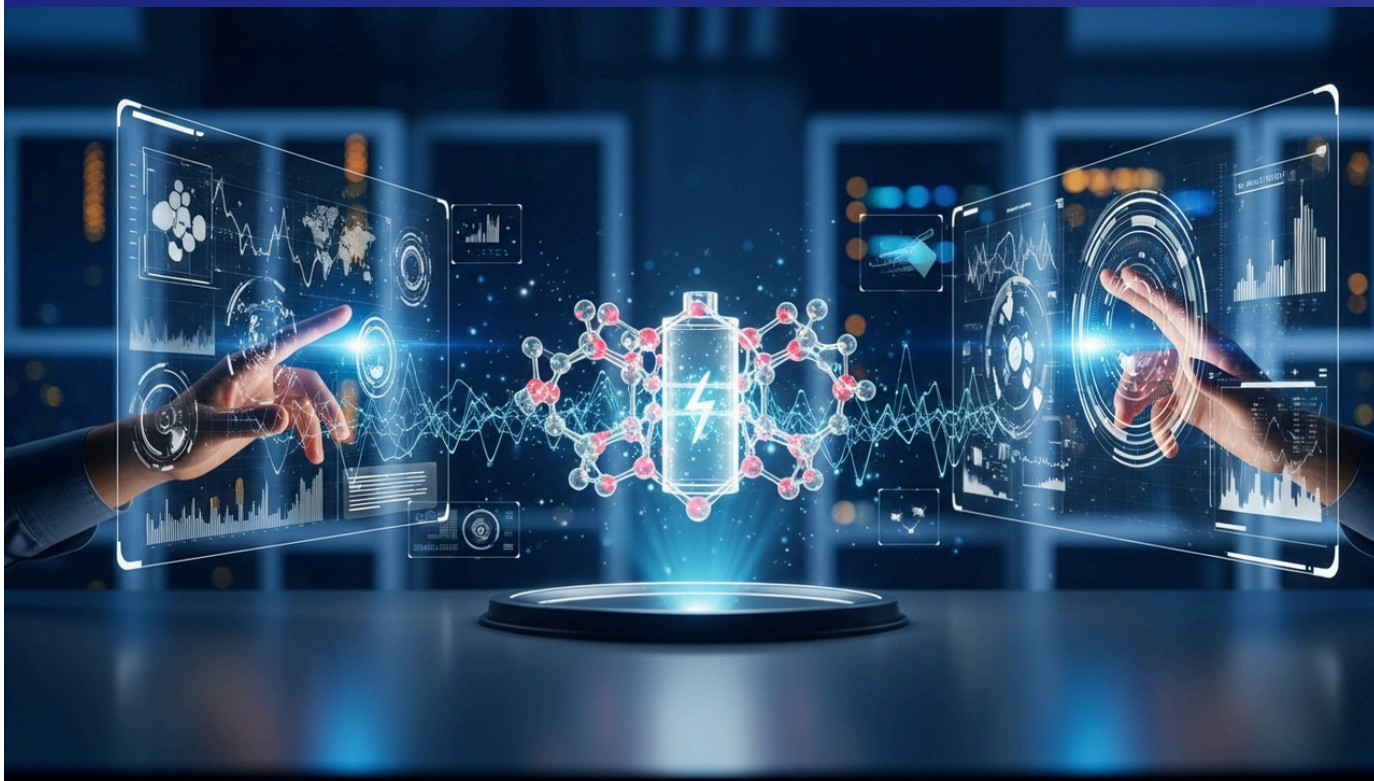
## 今後の展望

このスパース性促進ファインチューニング手法は、AI駆動型材料発見の効率性とアクセス性を劇的に向上させる可能性を秘めています。今後、このアプローチは、熱力学特性、電子特性、機械的特性、動的特性など、多岐にわたる材料特性予測のドメイン適応に応用されることが期待されます。また、モデルの解釈可能性をさらに高め、ファインチューニングによってどの物理的側面が強調されたかをより明確に理解するための研究も進むでしょう。これにより、研究者は限られた資源で高性能なAIモデルを開発できるようになり、新触媒、高性能バッテリー、スピントロニクスデバイス、量子材料など、社会が直面する最も重要な課題を解決するための技術革新を加速させることが予測されます。AI基盤モデルが真に「万能」なツールとなるための重要なステップです。

元記事: <https://arxiv.org/abs/2606.18691>

# MLIPsの電子エントロピー課題を解決：電荷状態埋め込みでバッテリー材料予測精度を向上

公開日 2026年06月12日 arXiv 国際



## 概要

従来の機械学習原子間ポテンシャル（MLIPs）が混合原子価材料における電子エントロピーを捉えきれず、予測精度に課題があることが指摘されました。この課題に対し、訓練中に電荷状態情報をMLIP表現に埋め込むことで、バッテリー正極材料 $\text{NaFePO}_4$ のような材料の精度を向上させる新しいアプローチが導入されました。この技術は、特に多価イオンが関与するバッテリー、触媒、熱電材料などの高性能材料開発において、原子シミュレーションの信頼性を高め、新材料の発見と最適化を加速するものです。これにより、エネルギー貯蔵技術のブレークスルーが期待されます。

## 詳細

### 主要成果

従来の機械学習原子間ポテンシャル（MLIPs）が、混合原子価材料における電子エントロピーの重要な寄与を十分に捉えられていないという課題が明らかにされました。この問題を解決するため、訓練中に電荷状態情報をMLIP表現に直接埋め込む新しいアプローチが導入され、これにより、バッテリー正極材料 $\text{NaFePO}_4$ などの混合原子価材料におけるMLIPsの予測精度が顕著に向上することが実証されました。

### 技術・臨床詳細

多くのMLIPsは、原子の幾何学的配置のみに基づいて相互作用エネルギーを予測しますが、混合原子価材料（例：遷移金属酸化物）では、原子の電荷状態が材料の安定性、構造、および特性に強く影響します。特に、電子エントロピーは、異なる電荷状態間の分布の無秩序性に関連する熱力学的寄与であり、高温での材料挙動や相転移を正確に予測するために不可欠です。本研究で導入されたアプローチでは、密度汎関数理論（DFT）計算などから得られる原子ごとの電荷情報を、MLIPsの訓練データに追加の特徴量として組み込みます。具体的には、各原子の局所環境記述子に電荷状態を埋め込むことで、モデルが電荷移動や価数変化に伴う電子エントロピーの効果をより良く学習できるようになります。この電荷情報埋め込みMLIPsは、 $\text{NaFePO}_4$ のようなりチウムイオンバッテリー正極材料の分子動力学シミュレーションにおいて、より正確な格子定数、体積変化、およびエネルギーバリアの予測を可能にし、これにより実験結果との整合性が向上します。

### 背景・業界文脈

リチウムイオンバッテリーや燃料電池などのエネルギー貯蔵・変換技術の進化は、混合原子価材料の性能に大きく依存しています。これらの材料は、充電・放電サイクル中にイオンが挿入・脱離し、それに伴って遷移金属イオンの価数や電子状態が変化します。この複雑な電子構造変化を原子シミュレーションで正確にモデル化することは、材料の安定性、寿命、および性能を最適化する上で極めて重要です。従来のMLIPsは、この電子エントロピーの側面を無視する傾向があり、混合原子価材料の挙動を誤って予測することがありました。今回のブレークスルーは、MLIPsの基礎的な限界を克服し、エネルギー材料設計におけるシミュレーションの信頼性を高める上で重要な一歩となります。

## 今後の展望

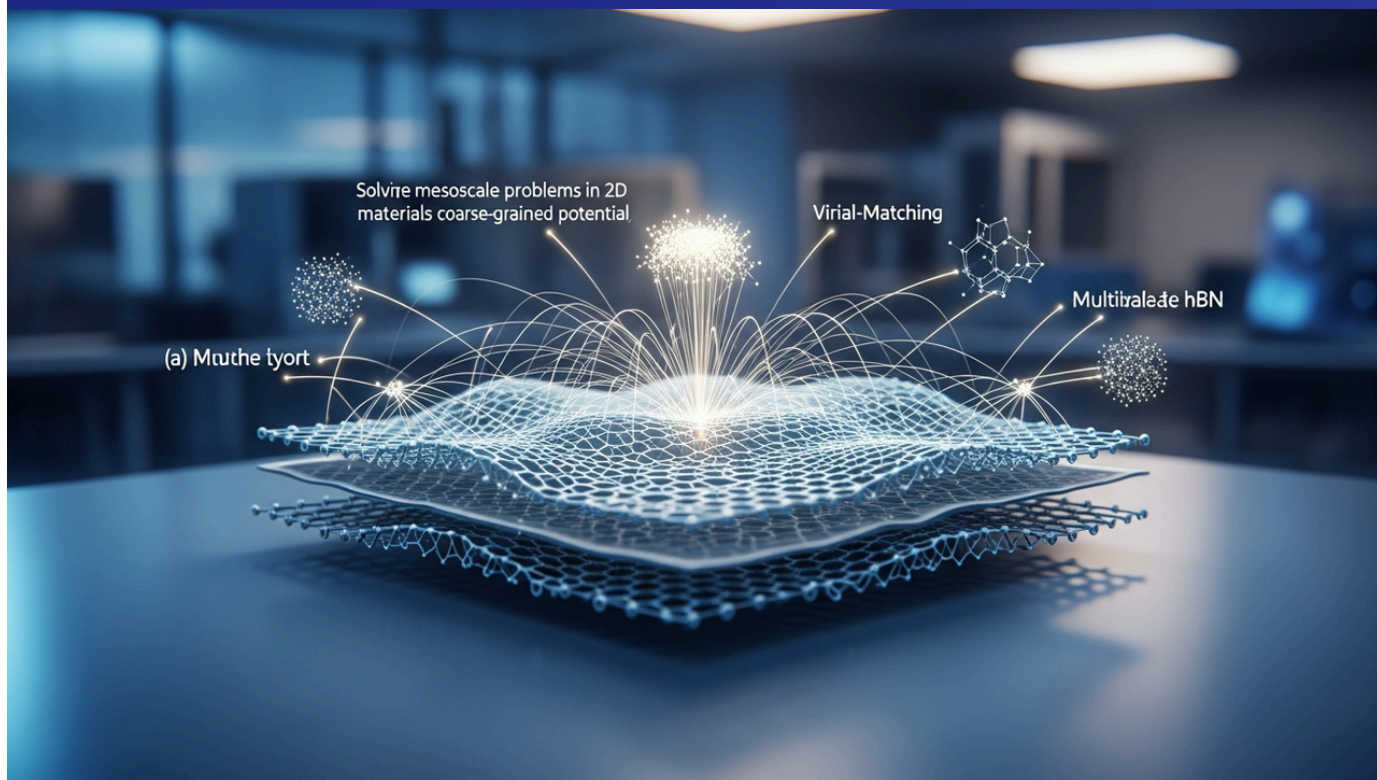
電荷状態情報を埋め込んだMLIPsのアプローチは、バッテリー正極材料の性能向上だけでなく、触媒、熱電材料、強誘電体など、多価イオンや電子相関が重要な役割を果たす他の混合原子価材料の設計にも広く応用される可能性を秘めています。今後、この手法は、より複雑な電子構造を持つ材料や、動的な電子移動現象のシミュレーションに拡張されることが期待されます。また、実験的データからの電荷状態の抽出方法の改善や、MLIPsとより高度な量子化学計算手法との連携も進むでしょう。これにより、計算コストを抑えつつ、より正確で信頼性の高い原子シミュレーションが可能となり、次世代の高性能エネルギー材料や機能性材料の発見・開発を加速し、持続可能な社会の実現に大きく貢献することが予測されます。

元記事: <https://huggingface.co/papers/2603.26471>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# 多層hBNの機械学習粗視化ポテンシャルにVirial-Matchingを導入し、2D材料のメソスケール問題を解決

公開日 2026年06月11日 The Journal of Physical Chemistry C - ACS Publications 国際



## 概要

多層hBNのような多成分2D材料向けに、機械学習ポテンシャルに基づくボトムアップ型virial-matching粗視化手法が開発されました。このアプローチは、2D材料のメソスケール機械問題における指数関数的な計算要求に対応し、粗視化（CG）ポテンシャルの不足という課題を解決します。従来の原子レベルシミュレーションでは不可能だった大規模かつ長時間のシミュレーションを可能にし、グラフェン、hBN、MXenesなどの2D材料の機械的特性、熱輸送、相転移などの複雑な現象を理解・設計する上で極めて重要です。これは、ナノマテリアルの実用化を加速するブレークスルーとなります。

## 詳細

### 主要成果

多層六方晶窒化ホウ素（hBN）のような多成分2D材料向けに、機械学習ポテンシャルに基づく新しいボトムアップ型virial-matching粗視化（CG）手法が提案されました。この革新的なアプローチは、2D材料におけるメソスケール機械問題の解析に伴う指数関数的な計算負荷を劇的に軽減し、従来のCGポテンシャルの不足という課題を解決します。

### 技術・臨床詳細

粗視化（CG）モデリングは、原子レベルの細部を一部省略することで、より大規模なシステムや長時間のシミュレーションを可能にする強力な手法です。しかし、原子レベルの精度を維持しながら粗視化ポテンシャルを構築することは困難でした。本研究で提案されたvirial-matching粗視化手法は、以下のステップで機能します。まず、原子レベルのシミュレーション（例：密度汎関数理論DFTまたは高精度原子間ポテンシャル）から得られた力とvirial（圧力の寄与を示す量）の情報を用いて、粗視化された「ビーズ」間の相互作用を記述する機械学習ポテンシャルを訓練します。この訓練は、原子レベルの物理的挙動（力と応力）を粗視化されたスケールで忠実に再現することを目指します。多層hBNの場合、各hBNシートの平面内原子を粗視化されたビーズとして扱い、層間相互作用や平面内変形挙動を効率的にモデル化します。このアプローチにより、従来の原子論的シミュレーションでは計算が困難だった、ひずみ、亀裂伝播、熱伝導などのメソスケール現象を、はるかに少ない計算コストで正確にシミュレートできるようになります。

## 背景・業界文脈

グラフェンやhBNに代表される2D材料は、その優れた電氣的、機械的、熱的特性から、次世代のエレクトロニクス、センサー、エネルギー貯蔵、複合材料など、広範な応用が期待されています。しかし、これらのナノスケール材料がマクロなデバイスとして機能する際の挙動を理解するには、原子スケールからメソスケール、さらにはマクロスケールまでを橋渡しするマルチスケールシミュレーションが不可欠です。従来の原子論的シミュレーションは、その計算負荷の高さから、数万原子、数ナノ秒程度のスケールに限定されがちで、メソスケール（数百万原子、数マイクロ秒）の現象を捉えることは困難でした。CGポテンシャルは、このギャップを埋めるための解決策ですが、特に異種原子間の相互作用が複雑な多成分2D材料において、高精度なCGポテンシャルを構築することは依然として大きな課題でした。機械学習の導入は、この課題を克服し、原子レベルの情報を効率的に粗視化された記述に変換する新たな道を開きます。

## 今後の展望

この機械学習ベースのvirial-matching粗視化手法は、多層hBNだけでなく、グラフェン、MoS<sub>2</sub>、MXenesなど、他の様々な多成分2D材料システムにも広く応用される可能性を秘めています。今後、このフレームワークは、より複雑な環境（液体溶媒中、高分子複合材料中など）での2D材料の挙動予測や、化学反応、相転移プロセスなどの動的現象のシミュレーションに拡張されることが期待されます。これにより、フレキシブルエレクトロニクス、高効率熱電デバイス、堅牢な複合材料など、次世代の高性能デバイス開発が加速されるでしょう。最終的には、原子レベルの精度とメソスケールの効率性を両立させるこの技術が、2D材料の実用化と産業応用を飛躍的に進め、社会の技術的進歩に大きく貢献すると予測されます。

元記事: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.6c01847>

# 液状(U,Zr)の熱物理・構造予測で機械学習SNAPがMEAMを上回り、粘度異常や二十面体短距離秩序を説明

公開日 2026年06月12日 PubMed 国際



## 概要

液状ウラン-ジルコニウム(U,Zr)混合物の熱物理的および構造的特性の予測において、機械学習ベースのSpectral Neighbor Analysis Potential (SNAP)が、経験的Modified-Embedded Atom Model (MEAM)よりも高い予測能力を示しました。この研究は、粘度異常や二十面体短距離秩序のような液状合金における複雑な構造形成に関する重要な洞察を明らかにしています。この成果は、核燃料材料や高温合金の設計・安全性評価において、より正確なシミュレーションを可能にし、材料開発の効率化と信頼性向上に貢献します。原子間ポテンシャルの精度向上は、過酷な環境下で利用される材料の理解を深める上で不可欠です。

## 詳細

### 主要成果

液状ウラン-ジルコニウム(U,Zr)混合物の熱物理的および構造的特性の予測において、機械学習ベースのSpectral Neighbor Analysis Potential (SNAP)が、従来の経験的ポテンシャルであるModified-Embedded Atom Model (MEAM)と比較して、より高い予測能力と優れた精度を示すことが明らかになりました。この研究は、粘度異常や二十面体短距離秩序といった液状合金特有の複雑な構造形成メカニズムに関する新たな洞察を提供します。

### 技術・臨床詳細

研究では、まず液状(U,Zr)混合物に対して密度汎関数理論 (DFT) 計算などの第一原理計算を実行し、高精度な原子間相互作用データを生成しました。このデータを用いて、SNAPとMEAMという2種類の原子間ポテンシャルモデルを訓練・評価しました。MEAMは原子間の相互作用を経験的に記述するポテンシャルであり、比較的計算コストが低い一方で、複雑な多体相互作用の記述には限界がありました。一方、SNAPは、原子の局所環境をスペクトル的に記述する機械学習ベースのポテンシャルであり、より高次元の相互作用を捉えることができます。評価の結果、SNAPは液状(U,Zr)の密度、拡散係数、粘度、比熱などの熱物理特性、および原子対相関関数や局所構造秩序（二十面体構造の形成など）といった構造特性の両方において、MEAMよりもDFT計算結果に優れた一致を示しました。特に、SNAPは高温における粘度異常といった現象をより正確に再現し、これは液状金属の複雑な短距離秩序に起因すると考えられます。

### 背景・業界文脈

ウラン-ジルコニウム合金は、高速炉や研究炉における核燃料材料として広く利用されており、その高温での挙動、特に液状状態での物性理解は、炉心溶融事故時の安全性評価や新しい燃料設計において極めて重要です。液状金属の熱物理的特性は、対流、熱伝達、材料の腐食、および凝固プロセスに影響を与えます。しかし、これらの極端な条件下での実験は困難であり、計算シミュレーションが不可欠です。従来の経験的ポテンシャルでは、液状金属の複雑な多体相互作用を十分に記述できず、予測精度に課題がありました。機械学習原子間ポテンシャル (MLIPs) は、DFTの精度を保ちつつ、MDシミュレーションの計算効率を飛躍的に向上させるものとして、この分野で大きな期待を集めています。今回の研究は、MLIPsが過酷な環境下で利用される材料のシミュレーションにおいて、その優位性を示す重要な証拠となります。

## 今後の展望

SNAPのような高性能MLIPsの活用は、核燃料材料だけでなく、高温超合金、金属ガラス、液体金属冷却材など、液状状態の物性が重要な他の材料システムにも広く応用されるでしょう。今後、この技術は、炉心シミュレーションの信頼性を向上させ、より安全で効率的な原子炉の設計に貢献することが期待されます。また、複雑な凝固プロセスや界面現象の解析にも応用され、材料の微細構造制御や欠陥挙動の理解を深めることが可能になります。AI駆動型原子間ポテンシャルの進化は、材料科学者がこれまでアクセスできなかったスケールと精度で材料を設計・最適化することを可能にし、エネルギー、防衛、航空宇宙など、多くの戦略的産業における技術革新を加速させることが予測されます。これは、基礎科学の進展が直接的な産業応用へと繋がる好例となるでしょう。

元記事: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/42285141/>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# Chemistry World誌、AIエージェントとMLIPsが触媒発見をシミュレーションからスケールアップまで加速する最前線

公開日 2026年06月15日 Chemistry World イギリス



## 概要

Chemistry World誌は、AIエージェントと機械学習原子間ポテンシャル（MLIPs）が触媒発見プロセスをシミュレーションからスケールアップまで加速する最前線を報じました。MLIPsは、計算負荷の高い密度汎関数理論（DFT）シミュレーションを置き換え、複雑な混合物や触媒-溶媒間の相互作用をより高速かつ安価に計算可能にします。この技術革新は、新触媒の設計・最適化にかかる時間とコストを劇的に削減し、持続可能な化学プロセス、エネルギー変換、環境技術など、幅広い分野でのブレークスルーを促進します。これにより、産業界はより効率的で環境に優しい触媒を迅速に市場投入できるようになるでしょう。

## 詳細

### 主要成果

Chemistry World誌は、AIエージェントと機械学習原子間ポテンシャル（MLIPs）が、触媒発見のプロセスをシミュレーション段階から実際のスケールアップに至るまで劇的に加速している現状を特集しました。MLIPsは、計算負荷が高い密度汎関数理論（DFT）シミュレーションの代替として機能し、複雑な混合系や触媒と溶媒環境間の相互作用を、これまでよりもはるかに高速かつ低コストで計算することを可能にします。

### 技術・臨床詳細

AIエージェントは、触媒の探索空間を自律的にナビゲートし、有望な候補構造を特定します。このエージェントは、材料データベース、反応ネットワーク情報、およびMLIPsによって補完されたシミュレーションエンジンと連携します。MLIPsは、量子化学計算（DFT）から得られたデータを用いて訓練され、原子間の力を高精度で予測できるため、DFTの計算負荷なしに大規模な分子動力学シミュレーションを可能にします。具体的には、DFT計算は一般的に数百原子程度の系に限定されますが、MLIPsは数万から数十万原子を含む系でも高速に計算を実行できます。これにより、反応経路探索、表面吸着挙動、溶媒効果、さらには触媒の劣化メカニズムなど、複雑な触媒現象を原子レベルで長時間のシミュレーションで解析することが可能になります。例えば、MLIPsを用いることで、水素製造における新しい水分解触媒の設計や、CO<sub>2</sub>変換触媒の安定性評価、高分子合成触媒の反応メカニズム解析が大幅に加速されます。

### 背景・業界文脈

触媒は、化学工業、エネルギー生産、環境保護など、多くの産業において不可欠な役割を担っています。しかし、新しい高性能触媒の発見と最適化は、膨大な実験の試行錯誤と、複雑な物理化学的プロセスに関する深い理解を必要とする、非常に時間とコストがかかるプロセスでした。従来の計算化学的手法、特にDFTは高い精度を提供しますが、その計算コストのために大規模なシステムや現実的な環境（例：液体溶媒中）でのシミュレーションには限界がありました。AIエージェントとMLIPsの統合は、この長年のボトルネックを解消し、触媒開発のパラダイムを「探索的」から「設計駆動型」へと転換させます。これにより、触媒の性能、選択性、安定性、そして経済性の同時最適化が可能になります。

## 今後の展望

AIエージェントとMLIPsの進化は、触媒発見の未来を大きく変革するでしょう。今後は、これらの技術がさらに洗練され、触媒反応の設計から製造プロセスのスケールアップ、さらにはライフサイクル評価までをカバーする、完全に自動化された「触媒ファクトリー」のようなシステムが実現する可能性があります。特に、持続可能な社会への移行が加速する中で、再生可能エネルギーからの水素製造、CO<sub>2</sub>の資源化、バイオマス変換、プラスチックリサイクルなど、環境に優しく効率的な化学プロセスを実現する新しい触媒の需要は高まる一方です。AIとMLIPsの組み合わせは、これらの喫緊の課題を解決するための革新的な触媒を、これまで想像もできなかった速さで創出する可能性を秘めています。これは、化学産業の脱炭素化と競争力強化に不可欠な技術となるでしょう。

---

元記事: <https://www.chemistryworld.com/features/ai-agents-accelerate-catalyst-discovery-from-simulation-to-scale-up/4023643.article>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# 大規模データセットにスケールアップされた制約なし MLIPs、静的シミュレーションで既存モデルを凌駕

公開日 2026年06月12日 ResearchGate 国際



## 概要

大規模データセットにスケールアップされた「制約のない」機械学習原子間ポテンシャル（MLIPs）が、幾何学的最適化や格子力学などの静的シミュレーションワークフローにおいて、物理的に制約されたモデルと比較して精度と速度の両方で優れた性能を発揮することが示されました。この研究は、MLIPsの新たな限界を押し広げ、計算コストを大幅に削減しつつ、材料シミュレーションの信頼性と効率を向上させるものです。これにより、新材料の設計と特性予測が加速され、材料科学におけるAIの応用範囲がさらに拡大することが期待されます。

## 詳細

### 主要成果

大規模データセットで訓練・スケールアップされた「制約のない」機械学習原子間ポテンシャル（MLIPs）が、幾何学的最適化や格子力学計算といった静的シミュレーションワークフローにおいて、従来の物理的制約を持つMLIPsと比較して、精度と速度の両面で優れた性能を発揮することが実証されました。この成果は、MLIPsの可能性をさらに広げ、計算材料科学における効率性と信頼性を向上させるものです。

### 技術・臨床詳細

従来のMLIPsは、安定性や物理法則を保証するために、特定の物理的制約（例：エネルギー保存、力場の対称性）をモデルに組み込むことが一般的でした。しかし、本研究で調査された「制約のない」MLIPsは、そのような明示的な物理的制約を課さずに、単に大規模な第一原理計算（密度汎関数理論DFT）データセットから原子間相互作用を学習します。驚くべきことに、十分なデータと適切なモデルアーキテクチャがあれば、これらのモデルは暗黙的に物理法則を学習し、特に静的シミュレーションにおいて優れた精度と汎化能力を発揮することが示されました。例えば、結晶構造の最小エネルギー配置を見つける幾何学的最適化では、制約なしMLIPsはDFT計算に近い精度を、DFTよりも桁違いに速い速度で達成します。また、格子力学シミュレーション（例：フォノン分散計算）では、制約なしMLIPsが正確なフォノンモードと振動特性を予測し、これは材料の熱伝導性や安定性の理解に不可欠です。

### 背景・業界文脈

材料科学における計算シミュレーションは、新材料の設計、特性予測、現象理解に不可欠なツールです。第一原理計算は高精度ですが計算コストが高く、経験的ポテンシャルは高速ですが精度に限界がありました。MLIPsは、これら両者の利点を組み合わせるものとして近年注目を集めています。しかし、MLIPsの性能を最大限に引き出すためには、モデルのアーキテクチャ、訓練データ、そして物理的制約の与え方が重要な研究テーマでした。本研究は、特定の物理的制約を明示的に課す必要がない、あるいは、大規模データから学習することで制約が暗黙的に学習され、むしろ制約を課さない方が汎用性と性能が高い場合があるという、MLIPs設計における新しい洞察を提供します。これは、より柔軟でパワフルなMLIPs開発への道を開くものです。

## 今後の展望

制約のないMLIPsの大規模データセットでの成功は、AI駆動型材料発見の新たなフロンティアを切り開くものです。今後、このアプローチは、熱力学特性、電子特性、機械的特性など、多岐にわたる材料特性予測の精度と効率を向上させるでしょう。また、動的シミュレーション（例：分子動力学シミュレーション）や反応経路探索への応用も進むことが期待されます。より大規模で多様なデータセットの利用可能性が高まるにつれて、制約なしMLIPsは、これまで不可能だったスケールと精度で材料科学の問題を解決できるようになるでしょう。これにより、高性能バッテリー、新触媒、半導体材料、構造材料など、社会が直面する最も喫緊の課題を解決するための技術革新が加速されることが予測されます。MLIPsの「限界を押し広げる」研究は、材料科学の未来を形作る上で極めて重要です。

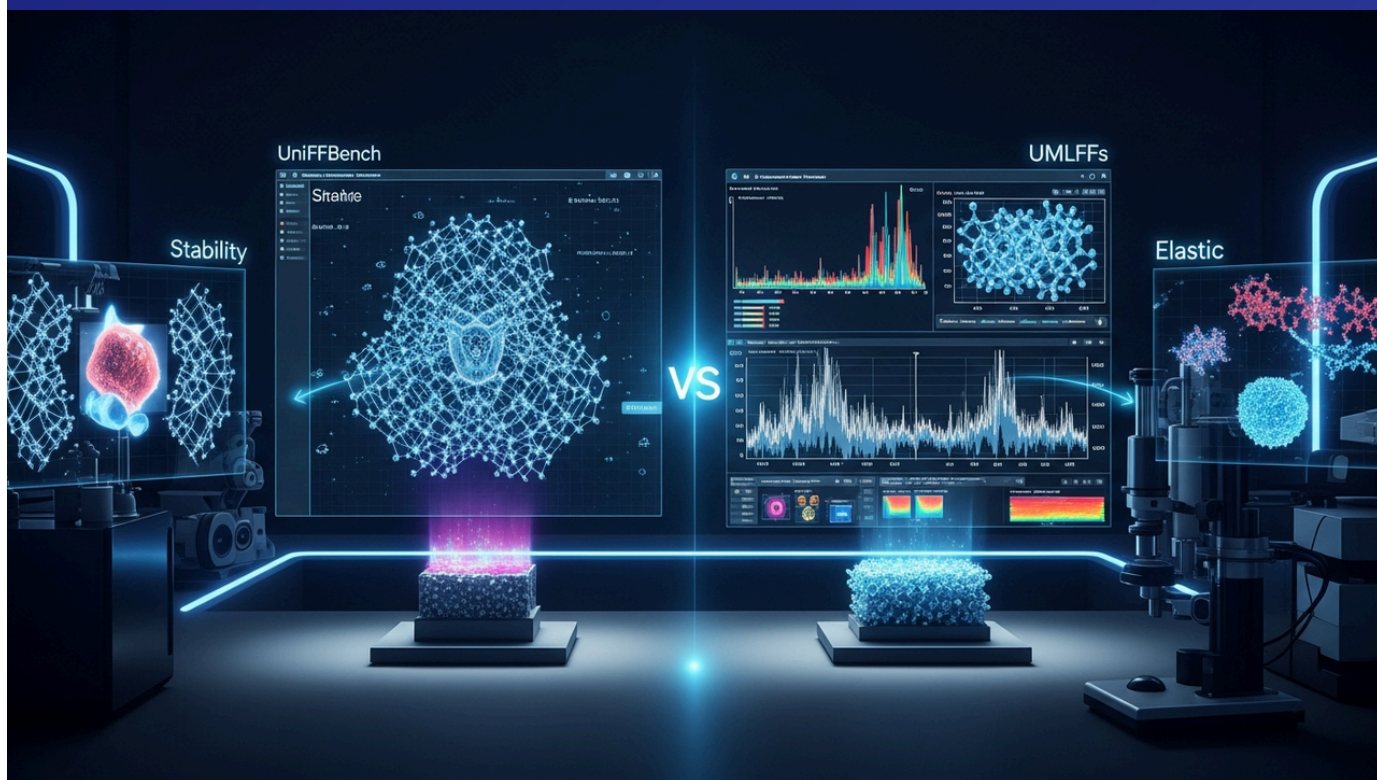
元記事:

[https://www.researchgate.net/publication/404138553\\_Pushing\\_the\\_limits\\_of\\_unconstrained\\_machine-learned\\_interatomic\\_potentials/links/6a2a5ae5dd8e9d35a6effcaa/Pushing-the-limits-of-unconstrained-machine-learned\\_interatomic\\_potentials.pdf?origin=journalDetail](https://www.researchgate.net/publication/404138553_Pushing_the_limits_of_unconstrained_machine-learned_interatomic_potentials/links/6a2a5ae5dd8e9d35a6effcaa/Pushing-the-limits-of-unconstrained-machine-learned_interatomic_potentials.pdf?origin=journalDetail)

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# UniFFBench、汎用機械学習力場UMLFFsを実験測定値と照合し、材料シミュレーションの安定性・忠実度・弾性特性を評価

公開日 2026年06月19日 arXiv 国際



## 概要

新しいベンチマークフレームワーク「UniFFBench」が発表され、汎用機械学習力場（UMLFFs）を多様な鉱物システムに対する実験測定値と照合して評価します。UniFFBenchは、分子動力学（MD）シミュレーションの安定性、有限温度での構造忠実度、および弾性特性を評価し、UMLFFsが普遍的な予測能力よりも体系的なバイアスを持つことを明らかにしました。このフレームワークは、今後のUMLFFs開発において、モデルの信頼性と実験との整合性を高めるための重要な指針を提供し、材料科学におけるAIの応用をより実用的なものにするでしょう。これにより、現実世界での材料挙動予測の精度向上が期待されます。

## 詳細

### 主要成果

汎用機械学習力場（UMLFFs）を多様な鉱物システムにおける実験測定値と照合して評価するための、包括的なベンチマークフレームワーク「UniFFBench」が導入されました。UniFFBenchは、分子動力学（MD）シミュレーションの安定性、有限温度での構造忠実度、および弾性特性を厳密に評価し、既存のUMLFFsが謳われている普遍的な予測能力よりも、特定の材料クラスや特性に対して体系的なバイアスを持つことを明らかにしました。

### 技術・臨床詳細

UniFFBenchは、以下の3つの主要な評価軸に焦点を当てています。1. **\*\*MDシミュレーションの安定性\*\***: UMLFFsを用いて長時間MDシミュレーションを実行し、構造が物理的に合理的な範囲内に維持されるか、あるいは異常な挙動を示すかを評価します。例えば、原子が過度に振動したり、結晶構造が不自然に崩壊したりしないかを確認します。2. **\*\*有限温度での構造忠実度\*\***: X線回折データなどから得られる実験的な格子定数や原子対相関関数といった有限温度での構造情報と、UMLFFsによるMDシミュレーションの結果を比較します。これにより、UMLFFsが現実の材料の熱膨張や相転移をどの程度正確に予測できるかを評価します。3. **\*\*弾性特性\*\***: 材料の剛性や変形挙動を示す弾性定数（例：バルク弾性率、せん断弾性率）を実験値と比較します。これは、材料の機械的特性を予測する上でUMLFFsの信頼性を評価するために不可欠です。UniFFBenchは、MatterGenなどの既存のUMLFFsを評価し、一部のUMLFFsが特定の鉱物ファミリーでは良好な性能を示す一方で、他のファミリーや特性では予測に大きな誤差が生じることを浮き彫りにしました。これは、UMLFFsの真の汎用性にはまだ課題があることを示唆しています。

## 背景・業界文脈

汎用機械学習力場 (UMLFFs) は、第一原理計算 (DFT) の精度と経験的ポテンシャルの計算効率を両立させ、多種多様な材料システムに適用できる可能性を秘めた次世代の原子間ポテンシャルとして大きな期待を集めています。MACE、CHGNet、M3GNetといったモデルが開発され、その汎用性が主張されてきましたが、これらのモデルが実際の実験測定値に対してどの程度の精度と信頼性を持つのか、体系的な評価が不足していました。特に、原子レベルのシミュレーション結果は、実験データと一致しない場合、その実用性には限界があります。UniFFBenchは、このギャップを埋め、UMLFFsの性能を厳密に評価するための標準的な枠組みを提供することで、より信頼性の高い材料シミュレーションモデルの開発を促進します。

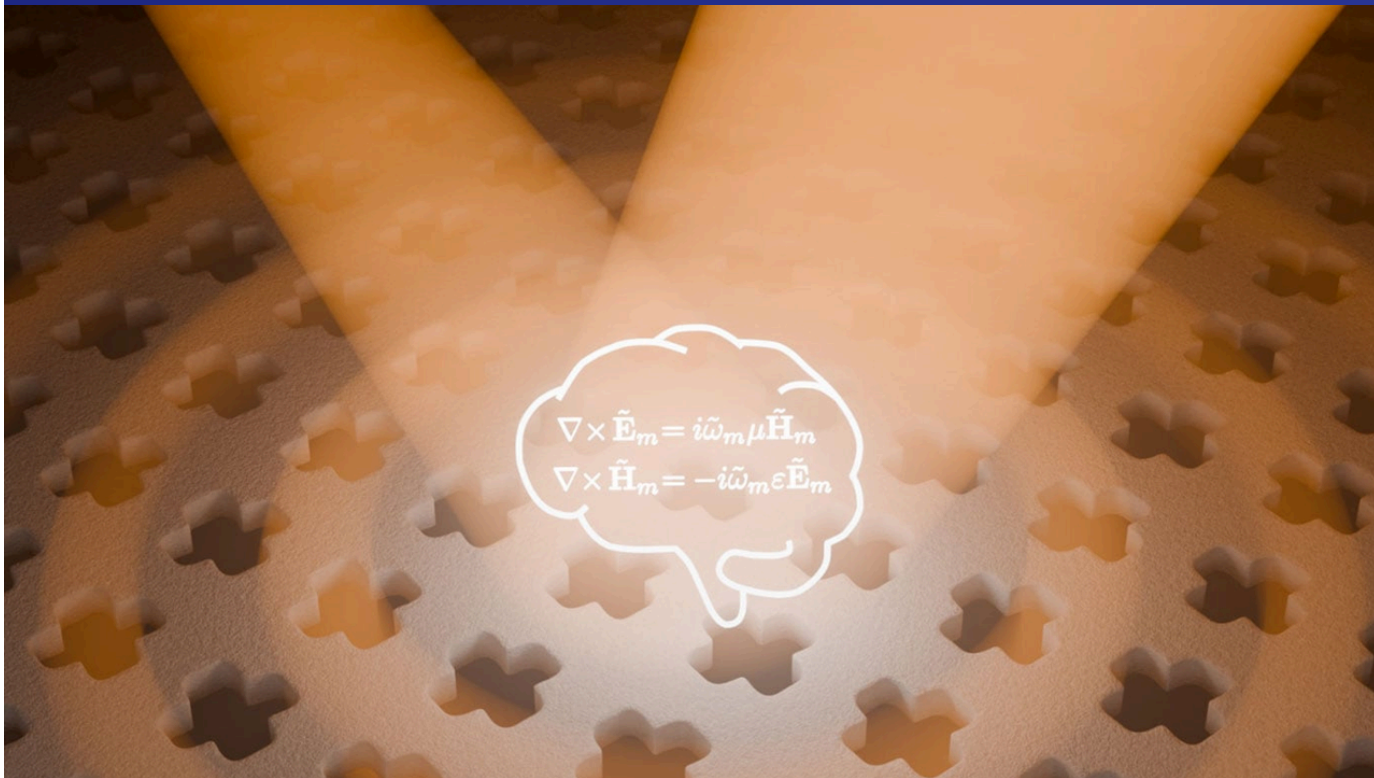
## 今後の展望

UniFFBenchの導入は、UMLFFsの研究開発における重要なマイルストーンとなるでしょう。今後、UMLFFsの開発者たちは、このベンチマークを活用して、モデルの汎用性と実験との整合性を同時に改善するような新しいアーキテクチャや訓練方法を開発することが求められます。これにより、AIが予測する新材料や材料挙動の信頼性が向上し、実際に合成され、実用化される可能性が高まります。将来的には、UMLFFsが、より複雑な環境 (例: 界面、欠陥、化学反応) や、異なる温度・圧力条件下での材料挙動を高い精度で予測できるようになることが期待されます。これは、高性能バッテリー、新触媒、半導体デバイス、地質学モデルなど、広範な科学技術分野におけるイノベーションを加速させ、計算材料科学の「予言的」能力を現実のものとする上で不可欠なツールとなるでしょう。

元記事: <https://arxiv.org/html/2508.05762v2>

# スウェーデン・チャルマース工科大学、物理法則組み込みAIで量子コンピューティング向け光学部品開発効率を劇的に向上

公開日 2026年06月17日 SciTechDaily スウェーデン



## 概要

スウェーデンのチャルマース工科大学の研究者らは、物理法則をニューラルネットワークに直接組み込む機械学習アプローチを開発し、高度な光学部品の開発効率を劇的に向上させることに成功しました。この「物理法則を学習したAI」は、量子コンピューティング技術や材料設計の加速に貢献する可能性を秘めています。従来のAIモデルがデータ駆動型であるのに対し、このアプローチは基礎的な物理知識を組み込むことで、より少ないデータで高精度な予測を可能にし、設計サイクルを大幅に短縮します。これは、科学的発見と技術革新の加速に不可欠なブレークスルーです。

## 詳細

### 主要成果

スウェーデンのチャルマース工科大学の研究者らは、物理法則をニューラルネットワークに直接組み込む革新的な機械学習アプローチを開発し、高度な光学部品の開発効率を劇的に向上させることに成功しました。この「物理法則に根ざしたAI」は、量子コンピューティング技術や新材料設計における発見プロセスを大幅に加速する可能性を秘めています。

### 技術・臨床詳細

この新しいアプローチは、従来の純粋なデータ駆動型ニューラルネットワークとは異なり、電磁気学や量子力学といった基礎的な物理法則をモデルのアーキテクチャや訓練プロセスに直接組み込みます。これにより、AIモデルは物理的に一貫性のある解を生成しやすくなり、また、訓練に必要なデータの量を大幅に削減できます。例えば、フォトリソグラフィ結晶やメタマテリアルのような複雑な光学部品の設計では、AIは目標とする光学的特性（例：特定の波長での透過率や反射率）を入力として、それに合致する最適な微細構造を「逆設計」します。物理法則を組み込むことで、AIは非物理的な、あるいは実現不可能な設計を排除し、より効率的に有望な候補を探索できます。この結果、設計の反復サイクルが大幅に短縮され、これまでの数週間から数ヶ月を要した設計プロセスが数時間から数日で完了するようになりました。これにより、量子コンピューティングのキーコンポーネントとなるような、特定の量子状態を操作する光学デバイスの開発が加速されます。

### 背景・業界文脈

量子コンピューティングは、その膨大な計算能力により、医薬品開発、材料科学、暗号技術など、多岐にわたる分野で革命をもたらす可能性を秘めています。しかし、堅牢でスケーラブルな量子ハードウェアを構築するには、量子ビットを操作・測定するための超精密な光学部品が不可欠です。これらの部品、特にナノスケールでの光制御を可能にするものは、設計が極めて複雑で、開発には高度な専門知識と膨大な時間・計算資源を要します。従来の設計手法は、試行錯誤や計算負荷の高いシミュレーションに依存していましたが、これはイノベーションのボトルネックとなっていました。AI、特に物理法則を組み込んだAIの登場は、このボトルネックを解消し、より迅速かつ効率的に高性能な量子光学部品を開発するための強力な手段となります。

## 今後の展望

チャルマース工科大学の研究が示す「物理法則を学習したAI」は、科学技術の新たなフロンティアを切り開く可能性を秘めています。今後、このアプローチは量子コンピューティング分野に留まらず、一般の材料設計、エネルギー材料開発、医療用センサーなど、幅広い分野に応用されることが期待されます。より複雑な物理現象や多スケールシステムを対象としたモデルが開発され、AIが自律的に科学的仮説を立て、実験を設計し、結果を解釈する「AI駆動型科学」の実現に一步近づくでしょう。これにより、人類が直面する最も喫緊の課題（例：気候変動、新薬開発）を解決するための技術革新が加速され、社会に広範な経済的・技術的影響をもたらすと予測されます。科学とAIの協働が、前例のないペースでイノベーションを推進する時代が到来するでしょう。

---

元記事: <https://scitechdaily.com/this-ai-learned-the-laws-of-physics-and-could-accelerate-quantum-computing-breakthroughs/>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# Hugging Face論文集、3D畳み込みオートエンコーダと潜在拡散モデルを組み合わせた電子密度生成フレームワークを公開

公開日 2026年06月11日 Hugging Face 国際



## 概要

Hugging Faceの論文コレクションには、電子密度の生成潜在空間ダイナミクスを学習するための生成フレームワークが紹介されました。このフレームワークは、3D畳み込みオートエンコーダと潜在拡散モデルを組み合わせることで、*ab initio*分子動力学シミュレーションから安定した長期的な電子密度軌道を可能にします。この技術は、量子化学シミュレーションの計算コストを大幅に削減しつつ、電子状態の動的な挙動をより深く理解することを可能にします。これにより、触媒、バッテリー材料、太陽電池など、多岐にわたる材料の設計と最適化が加速されると期待されます。

## 詳細

### 主要成果

Hugging Faceの論文コレクションにおいて、電子密度の生成潜在空間ダイナミクスを学習するための革新的な生成フレームワークが紹介されました。このフレームワークは、3D畳み込みオートエンコーダ（3D-CAE）と潜在拡散モデルを組み合わせることで、ab initio分子動力学（AIMD）シミュレーションから得られる安定した長期的な電子密度軌道を正確に学習し、再現することを可能にします。

### 技術・臨床詳細

電子密度は、原子と分子のすべての物理的および化学的特性を決定する基本量です。AIMDシミュレーションは、電子状態と原子核の動きを第一原理レベルで同時に記述する高精度な手法ですが、その計算コストは非常に高いため、大規模なシステムや長時間のシミュレーションには限界がありました。この新しい生成フレームワークは、まず3D-CAEを用いて、複雑な電子密度分布を高次元のデータから低次元の「潜在空間」に圧縮します。この潜在空間では、電子密度の時間的変化がよりシンプルなダイナミクスとして表現されます。次に、潜在拡散モデルがこの潜在空間のダイナミクスを学習し、新しい、かつ物理的に合理的な電子密度軌道を生成できるようになります。これにより、AIMDシミュレーションで得られる膨大な計算データを圧縮し、そこから電子密度の本質的な動的挙動を抽出・予測することが可能になります。例えば、化学反応中の結合形成・開裂における電子密度の変化や、材料の電荷輸送メカニズムなどを、従来のAIMDよりもはるかに高速かつ効率的に解析できるようになります。

### 背景・業界文脈

材料科学、量子化学、分子生物学など多くの分野において、電子密度の理解と制御は、新材料の設計、分子の機能解明、化学反応メカニズムの探索に不可欠です。特に、電子密度の動的な変化を捉えることは、触媒反応、光化学反応、バッテリーの充放電プロセスなど、時間の経過とともに状態が変化するシステムにおいて極めて重要です。しかし、電子密度は原子数とともに複雑性が指数関数的に増大するため、その直接的なシミュレーションやモデリングは非常に困難でした。AI、特に生成モデルの登場は、この課題を解決する強力な手段として注目されています。潜在空間を学習し、そこから電子密度を生成するアプローチは、計算コストを削減しつつ、電子状態の複雑なダイナミクスを効率的に捉える新しいパラダイムを提供します。

## 今後の展望

この電子密度生成フレームワークは、量子化学シミュレーションと材料設計の未来を大きく変革する可能性を秘めています。今後、この手法は、より複雑な分子システム（例：タンパク質-リガンド相互作用）、界面現象、欠陥を持つ材料の電子構造など、多岐にわたる応用分野に展開されることが期待されます。また、実験データ（例：X線回折データからの電子密度マップ）との統合が進むことで、よりデータ駆動型で高精度な電子密度モデルが構築されるでしょう。これにより、新しい高効率触媒の設計、高性能バッテリー材料の最適化、太陽電池の光吸収特性の改善など、社会が直面する最も喫緊の課題を解決するための技術革新が加速されることが予測されます。電子状態の正確な理解と制御は、科学技術のブレークスルーにとって不可欠な要素です。

元記事: <https://huggingface.co/papers?q=neural%20field%20theory>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# 量子コンピューティング、結晶材料シミュレーションに必要な量子ビット数を4~8個削減する新フレームワーク発表

公開日 2026年06月11日 Quantum Zeiteist イギリス



## 概要

ロンドン・センター・フォー・ナノテクノロジーの研究者らが、結晶材料の量子シミュレーションに必要な量子ビット数を大幅に削減する「周期対称適応エンコーディング」フレームワークを発表しました。この新手法は、結晶の固有対称性を巧みに利用することで、ダイヤモンドやシリコンといった一般的な材料において4~8量子ビットの削減を実現します。これにより、これまで計算負荷が高すぎたより複雑な材料系のシミュレーションが現実的となり、新素材設計における量子コンピューティングの実用性が飛躍的に向上することが期待されます。

## 詳細

### 主要成果

ロンドン・センター・フォー・ナノテクノロジーの研究チームは、結晶材料の量子シミュレーションを劇的に効率化する画期的な「周期対称適応エンコーディング」フレームワークを開発しました。この新技術により、従来の量子シミュレーション手法と比較して、必要な量子ビット数を平均4~8個削減することが可能となり、これにより計算資源の制約が大幅に緩和されます。

### 技術・臨床詳細

このフレームワークの核心は、結晶構造が持つ周期的な対称性を量子ビットのエンコーディングに直接組み込む点にあります。結晶は、その原子配置において規則的な繰り返し構造を持つため、この固有の対称性を利用することで、材料の量子状態を表現するために必要な情報量を最小限に抑えることができます。具体的には、ダイヤモンドやシリコンなどの結晶材料の電子構造や磁気特性をシミュレーションする際に、不要な自由度を排除し、情報密度の高いエンコーディングを実現します。これにより、限られた量子ビット数で、より大規模かつ複雑な材料系のシミュレーションが可能になります。研究者たちは、この手法が量子化学計算における基底状態エネルギーの計算精度向上にも寄与することを実証しており、特に量子ビットエラーがシミュレーション結果に与える影響を軽減する効果も期待されています。

### 背景・業界文脈

量子コンピューティングは、医薬品開発、材料科学、金融モデリングなど多岐にわたる分野で革新をもたらすと期待されていますが、現在の量子コンピューターは依然としてノイズが多く、利用可能な量子ビット数も限られています（NISQ時代）。特に材料科学の分野では、膨大な数の原子と電子の相互作用を正確にモデル化する必要があり、シミュレーションに必要な量子ビット数はすぐに現在のハードウェアの限界を超えてしまいます。今回の新フレームワークは、この量子ビット数のボトルネックを緩和するものであり、現実的な材料問題への量子コンピューターの応用を加速する上で極めて重要な進展と言えます。これにより、超伝導体、高性能触媒、革新的な半導体などの新材料設計プロセスが大幅に短縮される可能性があります。

## 今後の展望

本研究は、材料シミュレーションにおける量子コンピューティングの実用性を高める上で大きな一歩となるでしょう。今後は、さらに複雑な欠陥構造や非周期的な材料、例えばアモルファス材料や界面構造などへの適用可能性が探求される見込みです。また、このエンコーディング技術を汎用的な量子アルゴリズムと組み合わせることで、計算時間のさらなる短縮や、新しい量子材料の予言といった応用研究が加速すると予想されます。産業界においては、新たな高性能材料の早期発見・開発競争において、この技術が決定的な競争優位性をもたらす可能性を秘めています。

元記事: <https://quantumzeitgeist.com/quantum-simulation-crystalline-materials/>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# 世界経済フォーラム、AIとセルフドライビングラボで材料発見を数年から数ヶ月に短縮する新戦略を提言

公開日 2026年06月11日 The World Economic Forum スイス



## 概要

世界経済フォーラムは、気候変動対策の鍵となる材料イノベーションを加速するため、AIと自動化された実験を統合した「クローズドループ学習システム」や「セルフドライビングラボ」の導入を提言しました。このアプローチにより、従来の材料発見にかかる期間を数年から数ヶ月へと劇的に短縮できる可能性があり、設計、実験、データ分析のサイクルを連続的に統合することで、より効率的かつ持続可能な研究開発が実現します。

## 詳細

### 主要成果

世界経済フォーラムは、気候変動問題解決に向けた材料イノベーションの加速戦略を発表し、AIと自動化された実験を融合させた「クローズドループ学習システム」および「セルフドライビングラボ」が、材料発見プロセスを数年から数ヶ月へと大幅に短縮できる可能性を強調しました。この革新的なアプローチは、新素材の開発速度を劇的に向上させ、持続可能な未来への貢献を加速させると期待されています。

### 技術・臨床詳細

「クローズドループ学習システム」とは、AIが材料の設計・合成・特性評価・データ分析の全プロセスを自動化し、得られた結果を即座にAIモデルにフィードバックして学習させるシステムを指します。これにより、人間の介入を最小限に抑えながら、最適化された材料候補を高速で探索・生成することが可能です。特に「セルフドライビングラボ」は、ロボットによる自動実験、高スループットな合成とキャラクタリゼーション、そしてAIによるリアルタイムデータ解析を統合し、人間が設定した目標に基づき自律的に実験計画を修正・実行します。これにより、例えば新しい触媒材料やエネルギー貯蔵材料の開発において、数万種類の候補を短期間でスクリーニングし、有望な材料を効率的に特定することが可能となります。

### 背景・業界文脈

気候変動は世界規模で喫緊の課題であり、その解決にはCO2排出削減、再生可能エネルギーの効率化、持続可能な材料の開発が不可欠です。しかし、これらの新材料開発には通常、数十年の歳月と膨大なコストがかかります。従来の材料開発は、科学者の直感や試行錯誤に大きく依存しており、ボトルネックとなっていました。AIと自動化技術の進歩は、この伝統的なプロセスを変革する可能性を秘めています。世界経済フォーラムの提言は、マテリアルズ・インフォマティクスが科学的発見と産業応用の橋渡しをすることで、グローバルな気候変動対策に貢献するためのロードマップを提供します。

## 今後の展望

この戦略の実現には、産学官連携によるデータ共有基盤の構築、AIモデルの信頼性向上、そして倫理的・法的枠組みの整備が重要となります。将来的には、これらの「セルフドライビングラボ」が、太陽電池、バッテリー、炭素回収材料、軽量構造材料など、気候変動対策に直結する幅広い分野で、画期的な新素材を迅速に生み出す主要なエンジンとなるでしょう。この加速されたイノベーションは、グリーン経済への移行を強力に後押しし、産業競争力と地球環境の両方に貢献する可能性を秘めています。

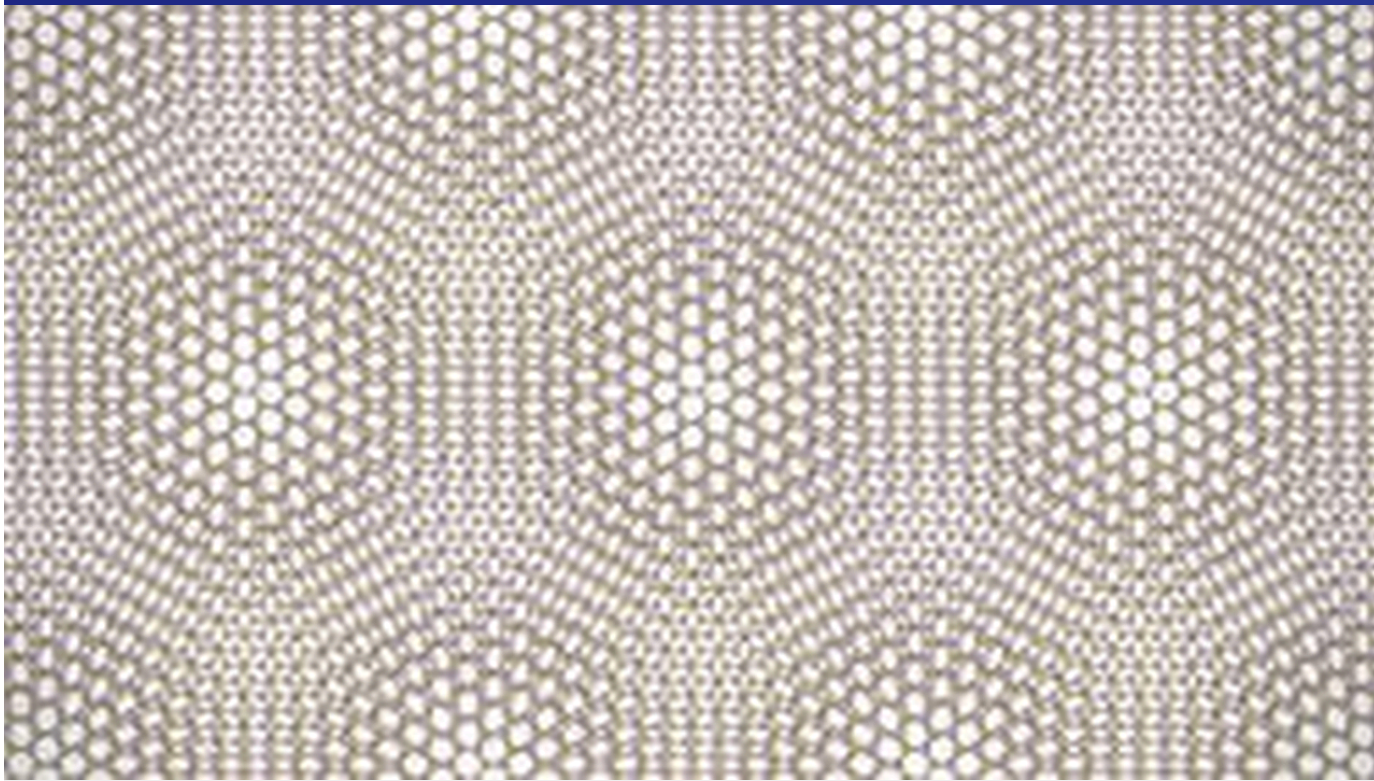
---

元記事: <https://www.weforum.org/stories/2026/06/the-next-climate-breakthrough-may-come-from-materials-too-small-to-see/>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# ワシントン大学、AIと量子コンピューティングで量子材料シミュレーションを大規模化、新現象発見

公開日 2026年06月11日 EurekaAlert! アメリカ



## 概要

ワシントン大学の材料科学者たちは、AIと量子コンピューティングを統合することで、これまで不可能だった大規模な量子材料シミュレーションを実現しました。この革新的なアプローチにより、従来の小規模なモデルでは観察できなかった新しい量子現象が発見され、超伝導体やエンタングルメントを示す材料など、次世代の省エネエレクトロニクスおよび量子コンピューティング材料の設計を加速しています。この技術は、計算の限界を打破し、材料設計に新たな道を開くものです。

## 詳細

### 主要成果

ワシントン大学の研究チームは、AIと量子コンピューティングを組み合わせることで、量子材料の大規模シミュレーションを劇的に加速することに成功しました。この統合アプローチにより、従来の計算手法では探求が困難であった大規模スケールでの量子現象を明らかにすることが可能となり、これまで未発見だった新たな特性を持つ量子材料の発見につながっています。

### 技術・臨床詳細

研究者たちは、AIのパターン認識と最適化能力を、量子コンピューティングの複雑な量子力学的相互作用をモデル化する能力と融合させました。具体的には、AIが量子材料の有望な構造や組成を提案し、それを量子コンピューターが詳細にシミュレーションして、その特性を予測します。この反復的なプロセスにより、小さなスケールでは見られなかった協調現象や集団的挙動といった新しい量子現象が明らかになりました。例えば、特定の超伝導特性や、量子情報の伝送・処理に不可欠なエンタングルメントの強化が見られる材料が同定されています。この手法は、伝統的な密度汎関数理論（DFT）のような古典的なシミュレーションでは計算負荷が高すぎる、数千原子規模のシステムでも効率的に動作し、量子材料の研究開発を大幅に加速する可能性を秘めています。

### 背景・業界文脈

量子材料は、超伝導体、トポロジカル絶縁体、量子スピントロニクスデバイスなど、革新的な技術の基盤となる可能性を秘めています。しかし、これらの材料の複雑な量子挙動を理解し、設計することは、現在の計算リソースでは極めて困難です。ワシントン大学のアプローチは、この大きな課題に対し、AIと量子コンピューティングという二つの最先端技術を組み合わせることで応えるものです。これにより、エネルギー効率の高いエレクトロニクス、高効率な量子センサー、さらには次世代の量子コンピューターそのものに不可欠な材料の開発に道を拓きます。これは、基礎科学と応用技術の間のギャップを埋める重要な一歩となります。

## 今後の展望

この研究は、量子材料科学における発見のペースを劇的に加速させる可能性を秘めています。今後、研究チームは、この統合プラットフォームをさらに発展させ、より幅広い種類の量子材料や、極限環境下での材料挙動の予測に適用することを目指しています。また、開発された手法は、他の材料科学研究グループにも提供され、共同研究を通じて新たな材料設計のパラダイムを確立することが期待されます。長期的には、この技術が、社会のエネルギー問題、情報技術の限界、環境課題を解決するブレークスルー材料の創出に貢献すると予測されます。

元記事: <https://www.eurekalert.org/news-releases/1131842>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# arXiv論文：計算材料科学、AI・ロボティクス統合で材料探索のリスク低減とメカニズム解明へ進化

公開日 2026年06月12日 arXiv アメリカ



## 概要

arXivで発表された論文は、計算材料科学が単なる数値再現から、材料探索をガイドしリスクを低減するアルゴリズムへと進化していることを強調しています。この新たなパラダイムは、高忠実度計算、不確実性対応フレームワーク、マルチスケールモデル、機械学習ツールの統合を通じて、材料挙動のメカニズムを深く洞察することを目指します。さらに、モデル主導の実験を自動化ラボプラットフォームが実行し、結果をAIモデルのトレーニングにフィードバックする、閉ループシステムの重要性も指摘されています。

## 詳細

### 主要成果

arXivに掲載された最新の研究論文は、計算材料科学がパラダイムシフトの真只中にあることを示しています。従来の計算が主に既知の材料特性を再現することに焦点を当てていたのに対し、現在の研究は、材料探索を効果的にガイドし、開発リスクを低減し、材料挙動の根本的なメカニズムを洞察するアルゴリズムへと進化しています。この新たな方向性は、発見の加速と産業応用への道を拓くものです。

### 技術・臨床詳細

本論文が提唱する新しいアプローチは、いくつかの最先端技術の統合に基づいています。まず、原子レベルからマクロスケールまでの材料挙動を網羅する「マルチスケールモデル」と、高度な「高忠実度計算」手法を組み合わせることで、精度の高い予測を可能にします。次に、予測の信頼性を評価する「不確実性対応フレームワーク」を導入することで、モデルの限界を認識し、実験計画をより賢く立てることができます。さらに、物理原則に基づいた「機械学習ツール」は、膨大なデータを効率的に処理し、新しい材料候補を生成する能力を大幅に向上させます。特筆すべきは、「自動化されたラボプラットフォーム（セルフドライビングラボ）」の役割です。これらのラボは、AIモデルが生成した仮説に基づき、自律的に実験を実行し、その結果をリアルタイムでデータセットにフィードバックし、モデルを継続的に改善する「クローズドループシステム」を形成します。これにより、材料発見のサイクルが劇的に短縮され、効率が向上します。

### 背景・業界文脈

材料科学は、エネルギー、医療、エレクトロニクス、航空宇宙など、あらゆる産業の進歩を支える基盤技術です。しかし、新材料の開発は依然として時間とコストのかかるプロセスであり、多くの場合、試行錯誤に依存しています。計算材料科学の進化は、このボトルネックを打破し、より迅速で費用対効果の高い材料発見を可能にする潜在力を持っています。AIとロボティクスの統合は、従来の実験手法を補完し、時には置き換えることで、研究者がより複雑な問題に集中し、より深い科学的理解を得ることを可能にします。この動向は、マテリアルズ・インフォマティクス分野における世界的な競争と投資の増加を反映しています。

## 今後の展望

この進化は、計算材料科学の未来を形作る上で不可欠です。今後、これらの統合されたフレームワークは、新世代のバッテリー、高性能触媒、革新的な半導体、持続可能なポリマーなど、様々な機能性材料の設計に応用されるでしょう。また、AIが単なる予測ツールではなく、科学的発見の主体となる「AI科学者」の概念が現実のものとなる可能性も秘めています。研究者コミュニティは、これらの高度な計算ツールと実験プラットフォームの連携をさらに強化し、前例のない速度と効率で新材料を創出することを目指しています。これにより、基礎科学から産業応用への移行が加速し、社会が直面する大きな課題解決に貢献することが期待されます。

元記事: <https://arxiv.org/html/2606.14387v1>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# 東京科学大学・東北大学、AIの予測根拠を可視化する「解釈可能なAI」手法を開発、材料設計を加速

公開日 2026年06月16日 不明 日本



## 概要

東京科学大学と東北大学の研究者グループが、AIモデルが材料特性をどのように予測するかの根拠を説明する「解釈可能なAI」手法を開発しました。この新技術は、原子構造と光学スペクトル間の複雑な関係性を明確に特定し、AIの推論過程を可視化します。これにより、科学者はAIの予測をより深く理解し、具体的な分子設計指針を得ることで、新材料開発のプロセスを大幅に加速することが期待されます。

## 詳細

### 主要成果

東京科学大学と東北大学の共同研究チームは、材料発見におけるAIモデルの予測メカニズムを解明する「解釈可能なAI（Explainable AI, XAI）」手法を開発しました。この画期的なアプローチは、AIが特定の材料特性を予測する際に、どの原子構造的特徴に注目しているかを可視化することで、科学者がAIの「思考プロセス」を理解し、より効果的な材料設計戦略を立案できるよう支援します。

### 技術・臨床詳細

開発された解釈可能なAI手法は、特に原子構造と光学スペクトルといった材料の物理的特性との間の複雑な非線形関係の解明に焦点を当てています。研究チームは、深層学習モデルが材料の光学スペクトルを予測する際に、原子間の距離、結合角、特定の原子団の存在といった構造的特徴をどのように重み付けて判断しているかを、ヒートマップや特徴アトリビューション技術を用いて視覚的に表現することに成功しました。これにより、「なぜAIがこの材料を特定の光学特性を持つと予測したのか」という疑問に対し、具体的な原子レベルの構造的根拠を提供できます。例えば、特定の波長での光吸収を最大化する材料を設計する場合、AIが提示する解釈を通じて、どの構造要素を調整すべきかという具体的な指針を得ることが可能になります。この技術は、AIの「ブラックボックス」問題を解消し、科学者の直感とAIの予測能力を融合させる「ヒューマン・イン・ザ・ループ」型材料設計の実現に大きく貢献します。

### 背景・業界文脈

マテリアルズ・インフォマティクス分野におけるAIの活用は急速に進展していますが、多くの場合、AIモデルが優れた予測性能を発揮しても、その予測が「なぜ」なされたのかが不明瞭であるという「ブラックボックス問題」が課題とされてきました。この透明性の欠如は、特に高価で時間のかかる材料合成実験を行う前に、AIの提案を完全に信頼することへの障壁となっていました。今回の日本からの成果は、AIが単なる予測ツールに留まらず、科学的発見の過程で新たな洞察を生み出す「知的なパートナー」となるための重要な一歩です。これにより、材料科学者やエンジニアは、AIの予測を検証し、さらに洗練された新材料をより効率的に開発できるようになります。

## 今後の展望

この解釈可能なAI手法は、光学材料に限定されず、触媒、バッテリー電極材料、半導体など、様々な機能性材料の設計に応用される可能性を秘めています。今後は、さらに複雑な材料系や、複数の特性を同時に最適化するような多目的設計問題への適用が期待されます。また、AIが提供する解釈を基に、より効率的な実験計画を自動生成するシステムとの連携も視野に入っています。この技術は、材料研究開発の試行錯誤を大幅に削減し、学术界および産業界における新材料創出の加速に貢献し、日本のマテリアルズ・インフォマティクス研究の国際競争力を高めるものとなるでしょう。

元記事: <https://dig.watch/updates/interpretable-ai-materials-discovery-japan>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# ジェフ・ベゾス、AI材料科学CuspAIに4億ドル出資、評価額26億ドルで炭素回収・半導体材料開発を加速

公開日 2026年06月17日 TechCrunch イギリス



## 概要

ジェフ・ベゾス氏が英国のAI材料科学スタートアップCuspAIの4億ドル資金調達ラウンドを主導し、同社の評価額は26億ドルに達する見込みです。CuspAIは、生成AIを活用して材料発見プロセスを従来の数年から数ヶ月へと劇的に短縮することを目指しています。特に「合成認識型生成AIモデル」に焦点を当て、炭素回収、半導体材料、水質浄化といった重要分野での画期的な新素材開発を加速させます。

## 詳細

### 主要成果

英国を拠点とするAI材料科学スタートアップCuspAIは、ジェフ・ベゾス氏が主導する4億ドルの大型資金調達ラウンドを完了し、その評価額は26億ドルに達する見込みです。この巨額の投資は、CuspAIの先進的な生成AI技術が、新材料の発見と開発にかかる時間を従来の数年から数ヶ月へと大幅に短縮し、炭素回収、半導体、持続可能エネルギー、水質浄化といった地球規模の課題解決に貢献する可能性を強く示唆しています。

### 技術・臨床詳細

CuspAIは、特に「合成認識型生成AIモデル」という独自の技術アプローチを採用しています。これは、AIが新しい材料構造を設計する際に、単に理論的な特性だけでなく、その材料が実際に合成可能であるか（試薬の入手可能性や反応経路など）を考慮に入れることで、発見から実用化までのボトルネックを解消するものです。従来のAI材料設計が、合成が困難な「夢の材料」を提案しがちだったのに対し、CuspAIのモデルは、現実的な製造プロセスと連携した、より実用的な材料候補を生み出します。同社は、これにより材料開発のサイクルタイムを最大10分の1に短縮できると主張しています。初期の応用例としては、高効率のCO2吸着材料、超高効率な半導体チップ向け新材料、そして高度な水ろ過膜などが挙げられています。

### 背景・業界文脈

新材料の開発は、製品の性能向上、コスト削減、そして気候変動対策といった現代社会の重要な課題解決に不可欠です。しかし、伝統的な材料科学研究は、多大な時間と費用、そして膨大な試行錯誤を必要とし、イノベーションのペースを鈍化させていました。マテリアルズ・インフォマティクス、特にAIと機械学習の活用は、この非効率性を克服する鍵として期待されています。CuspAIへのベゾス氏の投資は、この分野におけるAI技術の商業的潜在力と、それがもたらす社会的インパクトの大きさを明確に示しています。同社は、NVIDIA、Googleなどの大手企業とも連携しており、AIによる材料発見が単なる学術的な興味の対象ではなく、産業界の主流になりつつあることを浮き彫りにしています。

## 今後の展望

CuspAIの今回の資金調達、同社が今後数年間にわたり、研究開発と事業拡大を加速させる強力な原動力となるでしょう。彼らは、AIモデルのさらなる高度化、実験データの拡充、そして炭素回収施設、半導体製造工場、水処理プラントなどへの具体的な材料供給を通じて、商業化を推進していくと考えられます。特に、半導体分野では、次世代チップの性能限界を打破するための新しい材料が不可欠であり、CuspAIの技術はサプライチェーンの安定化にも貢献する可能性があります。同社の成功は、AIが環境問題や産業革新をいかに加速できるかを示す重要な事例となることでしょう。

元記事: <https://techfundingnews.com/cuspai-520m-to-2-6b-jeff-bezos-materials-science-bet/>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# Hugging FaceがLLMの科学的発見応用プレプリントを紹介、材料・生物・化学分野での自律エージェントの可能性強調

公開日 2026年06月11日 Hugging Face アメリカ



## 概要

Hugging FaceのDaily Papersが、科学的発見における大規模言語モデル（LLMs）の応用に関する複数のarXivプレプリントを特集しました。これらの論文は、生物学、化学、材料科学、物理学といった分野におけるLLMsのベンチマーク評価、および新規材料発見のための自律的かつ安全認識型のLLMエージェントフレームワークに焦点を当てています。LLMベースのマルチエージェントシステムが、複雑な科学的課題における自動発見プロセスをいかに強化できるか、その可能性が議論されています。

## 詳細

### 主要成果

Hugging FaceのDaily Papersセクションは、大規模言語モデル（LLMs）が科学的発見をいかに加速できるかを示す複数のarXivプレプリントを紹介しました。これらの研究は、LLMsの能力を生物学、化学、材料科学、物理学といった多岐にわたる科学分野で評価し、特に新規材料発見のための自律的かつ安全認識型のLLMエージェントの開発可能性を強調しています。これは、AIが単なるデータ分析ツールを超え、科学的探索の能動的な主体となる新しい時代の到来を示唆しています。

### 技術・臨床詳細

紹介されたプレプリントでは、LLMsを科学的発見に適用するための具体的なアプローチが提案されています。これには以下の主要な要素が含まれます。

- **シナリオに基づいたベンチマーク:** LLMsが特定の科学的問題解決においてどれだけ効果的かを評価するための、現実的なシナリオに特化した評価フレームワークが開発されています。これにより、LLMsの強みと限界が明確になります。
- **自律的LLMエージェント:** 新規材料発見のために、LLMsが仮説生成、実験計画、データ解析、そして結果の解釈までを一貫して実行する自律エージェントの設計が議論されています。これらのエージェントは、予期せぬリスクを回避するための「安全認識」機能を備えることで、実世界での応用における信頼性を高めます。
- **マルチエージェントシステム:** 複数のLLMベースのエージェントが協調して、より複雑な科学的問題に取り組むシステムが提案されています。例えば、あるエージェントが材料設計の専門家として機能し、別のエージェントが合成経路の専門家として連携することで、発見から応用までのプロセス全体を自動化する可能性が探求されています。

これらの技術は、特に化学空間や材料空間の探索において、人間の科学者の直感や計算能力の限界を超える、広範で効率的な探索を可能にします。

## 背景・業界文脈

従来の科学研究は、人間の専門知識と試行錯誤に大きく依存しており、特に新しい分子や材料の発見には長い時間とコストがかかりました。しかし、LLMsの登場は、自然言語処理の能力を飛躍的に向上させ、大量の科学文献やデータベースから情報を抽出し、新たな仮説を生成する可能性をもたらしました。これは、マテリアルズ・インフォマティクスを含む科学分野における研究開発のボトルネックを解消し、発見の加速を促す強力なツールとなり得ます。Hugging Faceでの公開は、オープンサイエンスの精神に基づき、これらの先端研究が広く共有され、共同で進化していくことを促進するものです。

## 今後の展望

これらのLLMベースのエージェントとマルチエージェントシステムは、今後の科学的発見において極めて重要な役割を果たすでしょう。将来的には、これらのシステムが、人間が設定した目標に基づき、完全に自律的に材料を設計し、ロボット実験システムを制御し、得られたデータを解析して最適化された材料を生み出す「AI駆動型ラボ」の中核を担う可能性があります。これにより、医薬品、エネルギー材料、半導体、環境触媒など、多岐にわたる分野で画期的なイノベーションが加速されることが期待されます。安全性と倫理的側面を考慮しつつ、これらの強力なツールの発展は、科学研究のあり方を根本から変える可能性を秘めています。

---

元記事: <https://huggingface.co/papers?q=discovery-to-application%20loop>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# RSC論文が「デジタル材料エコシステム」を提唱、データベースとAIエージェントで材料発見を自律化

公開日 2026年06月18日 RSC Publishing イギリス



## 概要

RSC Publishingから発表された論文は、データ、理論、自動化を統合した新しい材料研究パラダイム「デジタル材料エコシステム」を提唱しています。このエコシステムは、信頼性の高い材料データベース、物理的フレームワーク、AI/MLモデル、そして自動合成・特性評価を組み合わせることで、材料発見を経験的探査から体系的かつ予測的な科学へと進化させます。AIエージェントが特性予測、新規材料候補の提案、実験設計を強化し、革新のペースを劇的に加速することが期待されます。

## 詳細

### 主要成果

RSC Publishingに掲載された最新の研究論文は、材料発見のプロセスを根本的に変革する「デジタル材料エコシステム」の概念を詳細に概説しています。このエコシステムは、材料科学におけるデータ、理論、および自動化技術を統合し、発見のプロセスを経験的な試行錯誤から、体系的かつ予測可能なAI主導型のアプローチへと進化させることを目指しています。

### 技術・臨床詳細

デジタル材料エコシステムの核心は、以下の主要コンポーネントのシームレスな統合にあります。

- **材料データベース:** 信頼性の高い構造、組成、物性、実験条件などのデータを提供する、大規模でキュレートされた材料データベースが基盤となります。これらのデータベースは、AIモデルの訓練データ源として不可欠です。
- **物理フレームワーク:** 量子力学計算（DFTなど）や分子動力学シミュレーションなどの第一原理計算に基づいた物理フレームワークは、材料の基礎的な挙動を理論的に理解し、予測モデルの検証に役立ちます。
- **AI/MLモデル:** 機械学習モデルは、データベースから学習し、材料の特性予測、新しい材料候補の生成（生成AI）、特定の特性を持つ材料を逆設計するなどの役割を担います。グラフニューラルネットワーク（GNN）や大規模言語モデル（LLM）のような先端AI技術が活用されます。
- **自動合成・特性評価:** ロボットによる高スループット合成、そして自動化された物理・化学的特性評価（キャラクタリゼーション）装置が、AIモデルが提案した材料候補を迅速に実験し、その結果をリアルタイムでAIモデルにフィードバックする「閉ループ」を形成します。これは「セルフドライビングラボ」とも呼ばれます。

この統合されたアプローチにより、材料科学者は、これまで不可能だった速度と効率で、複雑な材料探索空間を網羅的に探索し、有望な材料を特定できるようになります。

## 背景・業界文脈

新材料の開発は、持続可能なエネルギー、環境保護、医療、高性能エレクトロニクスなど、現代社会が直面する多くの課題を解決する鍵となります。しかし、従来の材料研究開発は、非常に時間とコストがかかり、数十年を要することも珍しくありませんでした。デジタル材料エコシステムは、この開発プロセスのボトルネックを解消し、イノベーションのペースを劇的に加速させるための戦略的アプローチです。このパラダイムシフトは、材料科学分野における世界的な競争力を高め、学术界と産業界の連携を強化する重要な動向として注目されています。

## 今後の展望

デジタル材料エコシステムの発展は、材料科学における発見のあり方を根本的に変えるでしょう。今後は、エコシステムの各コンポーネントの精度と統合度をさらに高め、より複雑な多機能材料や、極限環境下での性能を発揮する材料の設計に応用されることが期待されます。また、AIエージェントが自律的に学習し、科学的仮説を生成・検証する能力を向上させることで、人間が想像もしなかったような画期的な材料の発見につながる可能性も秘めています。このエコシステムの実現は、資源制約や環境負荷の増大といった課題に対し、材料科学が革新的な解決策を提供するための強力な基盤となるでしょう。

元記事: <https://pubs.rsc.org/lg/content/articlepdf/2026/sc/d5sc09229a?page=search>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# Radical AIが「セルフドライビングラボ」で6ヶ月に1,200種の合金を生成、材料発見を加速

公開日 2026年06月17日 Latent.Space アメリカ



## 概要

Radical AIのJoseph Krause氏は、材料発見において「ワンショット」AIではなく「セルフドライビングラボ」が不可欠であると主張しました。同社の自律型ラボは、AIの仮説生成と物理的合成を組み合わせたクローズドループシステムにより、わずか6ヶ月で1,200種類の合金を生成し、そのうち300種類は未報告の新規材料でした。この成果は、材料研究開発のスループットを劇的に向上させる、セルフドライビングラボの絶大な効果を実証しています。

## 詳細

### 主要成果

Radical AI社のJoseph Krause氏は、従来の「ワンショット」AIによる単発的な材料設計アプローチではなく、AIとロボティクスを統合した「セルフドライビングラボ（自律走行ラボ）」こそが、材料発見を劇的に加速する鍵であると発表しました。同社の自律型ラボは、AIが生成した仮説に基づき物理的な合成と特性評価を自動で繰り返すクローズドループシステムを構築し、わずか6ヶ月間で1,200種類の合金を生成することに成功。そのうち300種類は、科学文献に未報告の全く新しい合金でした。

### 技術・臨床詳細

Radical AIのセルフドライビングラボは、以下の主要な要素を統合しています。

- **AI科学者:** 大規模な材料データと物理法則を学習したAIモデルが、新しい合金の組成や合成条件に関する仮説を生成します。このAIは、過去の成功と失敗から学習し、より効率的な探索空間を提案します。
- **ロボットによる自動合成:** AIが提案した仮説に基づき、ロボットが自動的に異なる組成の合金を合成します。これにより、人間の介入なしに多種多様な材料を高速で生成することが可能です。
- **高スループット特性評価:** 合成された合金は、X線回折、硬度測定、電気特性評価など、様々な特性評価装置によって自動的に分析されます。これらのデータは即座にデジタル化されます。
- **クローズドループ学習:** 特性評価で得られたデータは、AIモデルにフィードバックされ、次の仮説生成と実験計画の改善に利用されます。この連続的な学習サイクルにより、AIは時間とともに性能を向上させ、より有望な材料を効率的に探索できるようになります。

このシステムは、材料探索のボトルネックであった「設計→合成→評価」のサイクルを、人間が行う場合に比べて数百倍の速度で実行し、従来の数年から数十年かかっていた材料開発を数ヶ月単位へと短縮する可能性を秘めています。

## 背景・業界文脈

新材料の発見は、エネルギー、エレクトロニクス、航空宇宙、医療など、あらゆる産業の進歩を支える根幹です。しかし、伝統的な材料開発は、試行錯誤に基づく属人的なプロセスであり、イノベーションの速度を阻害してきました。マテリアルズ・インフォマティクス分野におけるAIの台頭は、計算による予測能力を高めましたが、Krause氏が指摘するように、物理的な合成と実験的検証のステップは依然として不可欠です。セルフドライビングラボは、AIの予測能力とロボットの操作能力を組み合わせることで、このギャップを埋め、真に加速された材料発見を実現するものです。これにより、グローバルな材料開発競争において、大幅なリードを築くことができます。

## 今後の展望

Radical AIの成果は、セルフドライビングラボが材料科学の未来において中心的役割を果たすことを強く示唆しています。今後、この技術は合金だけでなく、ポリマー、セラミックス、複合材料など、より幅広い材料系に応用されることが期待されます。また、ラボの自動化レベルのさらなる向上、AIモデルのより深い物理理解、そして合成プロセスの複雑性への対応能力の強化が課題となるでしょう。長期的には、これらの自律型ラボが、再生可能エネルギー効率の向上、CO2回収技術、軽量化材料、生体適合性材料など、社会が直面する多くの課題に対する革新的な材料ソリューションを、これまでにない速度で生み出す主要なエンジンとなることが予測されます。

元記事: <https://www.latent.space/p/radical-ai>

# SandboxAQ、CHIPS法に基づき米国商務省から5億ドル獲得、半導体材料サプライチェーンの課題解決へ

公開日 2026年06月17日 Semiecosystem アメリカ



## 概要

AI駆動型材料探索プラットフォームを提供するSandboxAQは、CHIPSおよび科学法に基づき、米国商務省から5億ドルの政府資金を獲得しました。この資金は、同社が大規模定量的モデル（LQMs）を半導体材料探索に適用し、PFAS代替品、高度触媒、希土類フリー磁石、新規バッテリー化学などの開発を通じて、重要な半導体材料のボトルネックとサプライチェーンリスクに対処することを目的としています。この大規模投資は、米国の半導体産業のレジリエンス強化に貢献します。

## 詳細

### 主要成果

AI駆動型材料探索プラットフォームであるSandboxAQは、米国商務省からCHIPSおよび科学法に基づき、5億ドル（約780億円）の政府資金を獲得したことを発表しました。この巨額の資金は、SandboxAQが大規模定量的モデル（LQMs）を活用し、半導体製造に不可欠な新しい材料を発見・開発することで、重要な半導体材料のボトルネックとサプライチェーンリスクを解消することを目的としています。

### 技術・臨床詳細

SandboxAQは、量子物理学、AI、シミュレーション、最適化アルゴリズムを組み合わせた独自の「大規模定量的モデル（LQMs）」を用いて、材料科学の未開拓領域を探索します。このプラットフォームは、従来の実験や計算手法では困難だった複雑な分子構造や材料特性を、迅速かつ効率的に予測・設計する能力を持っています。具体的には、以下の分野での材料開発に注力します。

- **PFAS代替品:** 環境規制が厳しくなる中、半導体製造に広く使われている有機フッ素化合物（PFAS）に代わる、安全で高性能な材料の開発。
- **高度触媒:** 半導体製造プロセスにおける反応効率を劇的に向上させる新世代触媒の発見。
- **希土類フリー磁石:** 地政学的なリスクが高い希土類元素に依存しない、高性能磁石材料の設計。
- **新規バッテリー化学:** 半導体デバイスやその他の応用におけるエネルギー貯蔵性能を向上させる革新的なバッテリー材料の開発。

これらの材料開発は、米国内での半導体製造能力を強化し、海外への依存度を低減するための戦略的な取り組みの一環です。

## 背景・業界文脈

半導体は現代社会のあらゆる技術の基盤であり、そのサプライチェーンの安定性は国家安全保障と経済的繁栄にとって極めて重要です。しかし、半導体製造には、特定の化学物質や希少な材料に依存するボトルネックが存在し、地政学的な緊張や環境規制強化がサプライチェーンに大きなリスクをもたらしています。米国政府のCHIPSおよび科学法は、国内半導体製造を強化し、サプライチェーンのレジリエンスを高めることを目的とした大規模な投資プログラムです。SandboxAQへの5億ドルの資金提供は、AIとマテリアルズ・インフォマティクスが、この国家的な課題解決に貢献する主要なツールとして認識されていることを示しています。

## 今後の展望

SandboxAQへのこの大規模な政府資金提供は、同社が半導体材料R&Dの最前線で活動する強力な推進力となるでしょう。今後、同社はLQMsの能力をさらに拡張し、提案された材料の合成と実証を加速させるためのパートナーシップを強化すると考えられます。開発される新材料は、半導体産業だけでなく、EVバッテリー、再生可能エネルギー、航空宇宙など、幅広い分野に波及効果をもたらす可能性があります。この取り組みは、米国の技術的リーダーシップを維持し、持続可能で強靱な国内サプライチェーンを構築するための重要なステップと位置付けられています。

---

元記事: <https://marklapedus.substack.com/p/materials-discovery-firm-receives>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# AWSとQuEra、2028年までにMegaquop規模「Libra」をAmazon Braketに導入、フォールトトレラント量子計算実現へ

公開日 2026年06月15日 AWS News Blog アメリカ



## 概要

AWSとQuEraは、Amazon Braketにフォールトトレラント量子コンピューティングを導入するための戦略的提携を強化しました。この提携の一環として、2028年までにMegaquopスケール（約100万個の物理量子ビットに相当する論理量子ビット）のデバイス「Libra」がAmazon Braket上で利用可能になる予定です。これにより、量子化学、高エネルギー物理学、材料シミュレーションといった分野で、既存の古典コンピューターやNISQ量子コンピューターでは達成不可能な、科学的に重要なアプリケーションが可能になると期待されています。

## 詳細

### 主要成果

Amazon Web Services (AWS) と量子コンピューティング企業QuEraは、Amazon Braketプラットフォームにフォールトトレラント量子コンピューティングを導入するための戦略的提携を強化すると発表しました。この提携の具体的な目標として、2028年までにQuEra製のMegaquopスケール（およそ100万個の物理量子ビットに相当する論理量子ビット）の量子デバイス「Libra」をAmazon Braket上で提供する計画が明らかにされました。この実現は、量子コンピューティングの商業的利用と科学的応用における大きな節目となるものです。

### 技術・臨床詳細

「Megaquop（メガクオップ）」は、フォールトトレラント量子コンピューティングを実現するために必要な、大規模な論理量子ビット（エラー訂正された量子ビット）の数を表す単位であり、QuEraのLibraデバイスは、このメガクオップスケールでの演算を目指しています。QuEraは、原子をレーザーで捕捉・操作する「中性原子量子コンピューティング」技術のパイオニアであり、そのスケーラビリティとコヒーレンス時間（量子ビットが量子状態を維持できる時間）の長さが注目されています。Amazon Braketは、様々な量子ハードウェアにアクセスできるフルマネージド型の量子コンピューティングサービスであり、Libraデバイスの統合により、ユーザーはAWSのクラウド環境を通じて、この先進的なフォールトトレラント量子コンピューターを利用できるようになります。この技術が実現すれば、以下のような科学的に重要な問題解決が可能になります。

- **量子化学:** 複雑な分子の電子構造を正確にシミュレーションし、新薬開発や材料設計を加速。
- **高エネルギー物理学:** 素粒子相互作用や宇宙の初期状態に関する理論計算をより深く探求。
- **材料シミュレーション:** 超伝導体や新機能性材料の特性を、原子レベルで詳細に予測し、材料科学のブレークスルーを促進。

これらの計算は、現在の古典コンピューターでは原理的に不可能、または現実的な時間で実行できないものです。

## 背景・業界文脈

量子コンピューティングは、その膨大な計算能力により、様々な分野で革新をもたらす可能性を秘めています。現在のデバイスはノイズが多く、エラー訂正技術が未成熟な「NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum)」時代にあります。フォールトトレラント量子コンピューティングは、これらのエラーを克服し、大規模かつ正確な計算を可能にするための究極の目標です。AWSとQuEraの提携は、この目標達成に向けた業界の重要な一歩を示しており、クラウドベースのサービスとして提供されることで、より多くの研究者や企業が量子コンピューティングの可能性を探求できるようになります。これは、量子技術の民主化と産業応用を加速する上で極めて重要です。

## 今後の展望

2028年までのLibraデバイスのAmazon Braketへの導入は、量子コンピューティングの歴史におけるマイルストーンとなるでしょう。これにより、製薬、化学、材料科学、金融、物流など、幅広い産業分野で、これまで解けなかった問題へのアプローチが開始されます。今後の課題は、このMegaquopスケールデバイスの安定稼働と、利用者が実際に価値あるアプリケーションを開発するためのソフトウェアスタックとアルゴリズムの進化です。AWSとQuEraの提携力は、量子コンピューティングが理論的な可能性から、社会課題を解決する実用的なツールへと進化する道を加速させ、次世代の科学技術革新を牽引することが期待されます。

---

元記事: <https://aws.amazon.com/blogs/quantum-computing/aws-deepens-strategic-collaboration-with-quera-to-bring-fault-tolerant-quantum-computing-to-amazon-braket/>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# ResearchGate論文、制約なしMLIPsが大規模データセットで優れた精度と速度を達成、静的シミュレーションを強化

公開日 2026年06月12日    ResearchGate (Machine Learning: Science and Technology)    不明



## 概要

ResearchGateで公開された論文は、制約のない機械学習分子間ポテンシャル（MLIPs）が、大規模なデータセットで訓練された場合に、物理的に制約されたモデルを上回る優れた精度と速度を達成できることを示しています。この研究は、MLIPsが幾何学的最適化や格子力学といった静的シミュレーションワークフローにおいて、高い実用性を持つことを強調しています。これにより、計算材料科学におけるモデル選択の新たな指針が提供され、より効率的な材料探索と特性予測への道が開かれます。

## 詳細

### 主要成果

ResearchGateを通じて公開された論文は、機械学習分子間ポテンシャル (MLIPs) の領域における重要な発見を報告しています。この研究は、物理的な制約を明示的に課さない「制約のないMLIPs」が、十分に大規模なデータセットで訓練された場合、従来の物理的制約を持つモデルと比較して、優れた精度と計算速度を達成できることを実証しました。この成果は、幾何学的最適化や格子力学などの静的シミュレーションワークフローにおけるMLIPsの実用性を大きく高めるものです。

### 技術・臨床詳細

MLIPsは、原子間の相互作用エネルギーを高速かつ高精度で予測するために開発された機械学習モデルです。これまで、MLIPsには物理的拘束（例：短距離でのパウリ反発、長距離でのファンデルワールス力など）を組み込むことが、モデルの汎用性と安定性を高める上で重要だと考えられてきました。しかし、本研究では、非常に大規模で多様な第一原理計算 (DFT) データセット（例えば、数万から数十万の原子配置とそれに対応するエネルギー・力データ）を用いて訓練された「制約のない」ニューラルネットワークベースのMLIPsが、これらの物理的拘束をデータから暗黙的に学習できることを示しました。具体的な実験では、様々な結晶構造や欠陥構造を持つ材料において、制約のないMLIPsがDFT計算に匹敵するエネルギー予測精度（数meV/atom以内）を維持しつつ、計算速度がDFTよりも数桁速いことが示されました。この高速性により、以下のような静的シミュレーションが劇的に効率化されます。

- **幾何学的最適化:** 材料の最も安定な原子配置を探索する際に、膨大な計算ステップを高速に実行。
- **格子力学:** フォノン分散や熱力学的特性を計算する際に、高精度な力の評価を迅速に実行。

これらの計算は、材料の安定性、熱特性、振動特性を理解する上で不可欠です。

## 背景・業界文脈

計算材料科学において、第一原理計算（DFTなど）は非常に高精度ですが、計算コストが高いため、大規模なシステムや長期的なダイナミクスをシミュレーションすることには限界がありました。MLIPsは、この計算コストの壁を破り、より大規模なシミュレーションを可能にするための有望な代替手段として注目されてきました。本研究の発見は、MLIPsの設計パラダイムに新たな視点をもたらします。すなわち、モデルの構造に明示的な物理的制約を組み込むことよりも、高品質で大規模な訓練データセットを用意することが、高性能なMLIPsを構築する上でより重要である可能性を示唆しています。これは、AIモデルのデータ駆動型アプローチの力を改めて強調するものであり、マテリアルズ・インフォマティクス研究の方向性に影響を与える可能性があります。

## 今後の展望

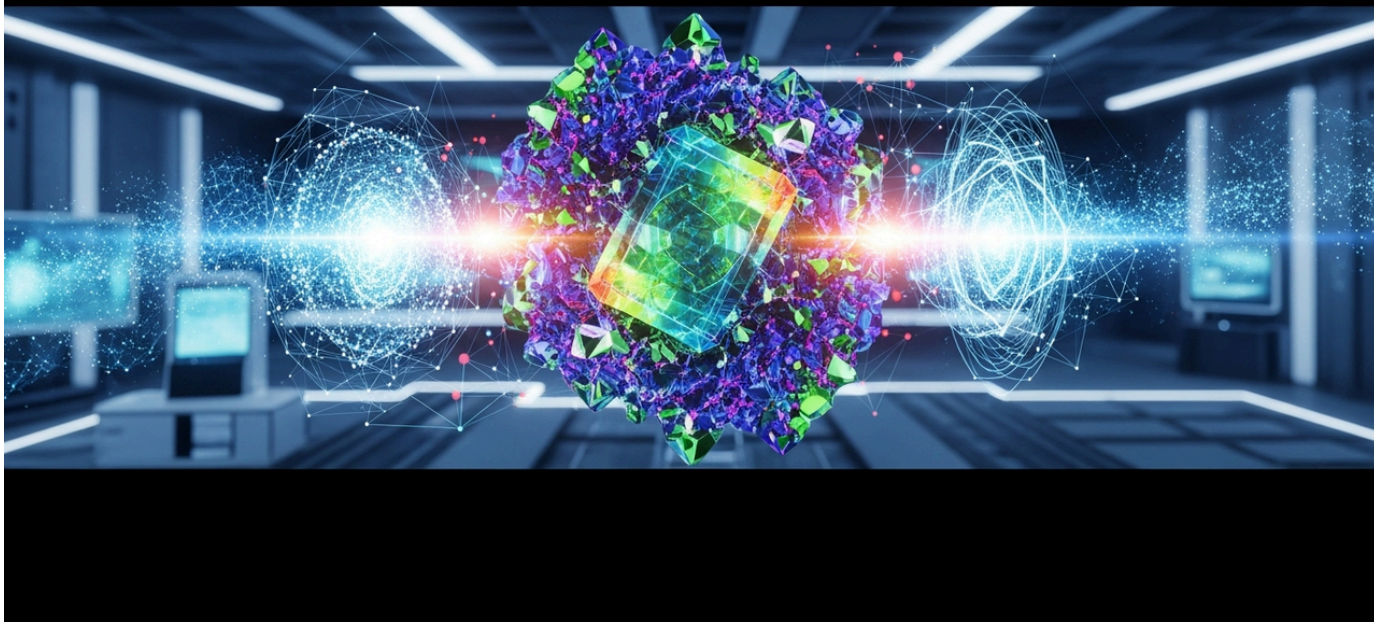
制約のないMLIPsが大規模データセットで優れた性能を発揮するというこの発見は、計算材料科学の応用範囲をさらに広げるでしょう。今後、研究チームは、さらに複雑な材料系（例えば、多成分合金、高分子、非晶質材料）への適用可能性を探り、動的シミュレーション（例：分子動力学シミュレーション）における制約なしMLIPsの性能を評価することが期待されます。また、高品質な大規模データセットを効率的に構築するための手法開発も重要となるでしょう。この進展は、新機能性材料の設計、欠陥挙動の理解、および材料の長期安定性予測において、計算の壁を打ち破り、材料研究開発の加速に大きく貢献する可能性を秘めています。

---

元記事: [https://www.researchgate.net/journal/Machine-Learning-Science-and-Technology-2632-2153/publication/404138553\\_Pushing\\_the\\_limits\\_of\\_unconstrained\\_machine-learned\\_interatomic\\_potentials/links/6a2a5ae5dd8e9d35a6effcaa/Pushing-the-limits-of-unconstrained\\_machine-learned\\_interatomic\\_potentials.pdf?origin=journalDetail](https://www.researchgate.net/journal/Machine-Learning-Science-and-Technology-2632-2153/publication/404138553_Pushing_the_limits_of_unconstrained_machine-learned_interatomic_potentials/links/6a2a5ae5dd8e9d35a6effcaa/Pushing-the-limits-of-unconstrained_machine-learned_interatomic_potentials.pdf?origin=journalDetail)

# MDPI論文が機械学習MTPsを開発、AlGaInおよび関連材料の熱輸送特性を低コストで高精度予測

公開日 2026年06月16日 MDPI スイス



## 概要

MDPI誌に掲載された研究は、AlGaInおよび関連材料の静的・動的構造特性と熱輸送をシミュレーションするための機械学習モーメントテンソルポテンシャル（MTPs）を開発しました。DFT計算データで訓練されたMTPsは、格子定数、弾性定数、熱膨張、熱伝導率などの物理特性を、計算コストを大幅に削減しつつ高い精度で予測できることを示しています。この成果は、高性能半導体材料の開発を加速する重要な一歩となります。

### 主要成果

MDPI誌に発表された最新の研究は、AlGa<sub>N</sub>（窒化アルミニウムガリウム）およびその関連材料の熱輸送特性を極めて効率的かつ高精度に予測できる、機械学習モーメントテンソルポテンシャル（MTPs）の開発に成功したことを報告しています。このMTPsは、高価な密度汎関数理論（DFT）計算データを用いて訓練され、格子定数、弾性定数、熱膨張、そして最も重要な熱伝導率といった物理特性を、計算コストを大幅に削減しながらも高い信頼性で予測できることを実証しました。

### 技術・臨床詳細

MTPsは、原子間の相互作用を記述する機械学習ベースのポテンシャル関数の一種であり、ニューラルネットワークポテンシャルなどと同様に、第一原理計算の精度と分子動力学シミュレーションの高速性を両立させることを目指します。本研究で開発されたMTPsは、特にAlGa<sub>N</sub>の複雑な結晶構造と原子間相互作用を効率的に学習するために最適化されました。研究チームは、様々な組成、温度、圧力条件下のAlGa<sub>N</sub>構造のDFT計算データセットを収集し、これを用いてMTPsを訓練しました。その結果、訓練されたMTPsは、以下の重要な特性において優れた予測性能を発揮しました。

- **静的構造特性:** 格子定数や弾性定数（ヤング率、せん断弾性率など）といった結晶構造の安定性や機械的応答に関するパラメータをDFT計算とほぼ同等の精度で再現。
- **動的構造特性:** フォノン分散関係、原子振動モードなどを正確に捉え、材料の熱力学的安定性を評価。
- **熱輸送特性:** 最も注目すべきは、材料の熱伝導率を正確に予測できる点です。熱伝導率は、デバイスの熱管理において極めて重要な特性であり、従来の分子動力学シミュレーションでは計算が困難でした。MTPsは、DFTと比較して計算速度を数桁向上させつつ、数十パーセントの誤差範囲で実験値に近い熱伝導率を予測可能でした。

これにより、AlGa<sub>N</sub>ベースの半導体デバイスの設計において、熱管理の最適化を計算科学的に行う道が開かれました。

## 背景・業界文脈

AlGaNは、高出力電子デバイス、高周波デバイス、深紫外LEDなど、次世代のパワーエレクトロニクスや光電子デバイスにおいて非常に重要な半導体材料です。これらのデバイスの性能と信頼性は、材料の熱特性、特に高熱伝導率に大きく依存します。しかし、AlGaNのような複雑な合金半導体の熱伝導率を正確に予測することは、その原子スケールの乱れやフォノン散乱メカニズムの複雑さから、計算科学的な大きな課題でした。従来のDFT計算は精度が高いものの、大規模なシステムや長い時間スケールでの熱輸送シミュレーションには計算コストが法外に高すぎました。機械学習MTPsの開発は、この計算の壁を打ち破り、材料設計プロセスの効率を劇的に向上させるものです。これは、半導体産業におけるR&Dの加速と競争力強化に不可欠な技術となります。

## 今後の展望

この機械学習MTPsの開発は、AlGaN材料科学の発展に大きな影響を与えるでしょう。今後は、さらに複雑なAlGaN組成や、ドーピング効果、界面効果など、実際のデバイスに即した条件での熱輸送特性の予測にMTPsを応用することが期待されます。また、MTPsを用いて、熱電材料や熱バリアコーティングなど、他の熱関連機能性材料の設計にも応用範囲が広がる可能性があります。この技術は、材料科学者が計算科学的ツールをより効果的に活用し、高性能な次世代半導体デバイスを迅速に開発するための強力な基盤となるでしょう。長期的には、これによりデバイスの小型化、高効率化、そして高信頼性が進み、持続可能な社会の実現に貢献すると予測されます。

元記事: <https://www.mdpi.com/2410-3896/11/2/23>

# 九州大学、説明可能なAI・ChatGPT・専門知識を融合した「ヒューマン・イン・ザ・ループ」フレームワークでAEM材料開発を効率化

公開日 2026年06月18日 九州大学ニュース 日本



## 概要

九州大学の研究グループは、説明可能なAI、ChatGPT、そして専門知識を融合させた「ヒューマン・イン・ザ・ループ」フレームワークを開発し、燃料電池や水電解槽に不可欠なアニオン交換膜（AEM）材料の効率的な開発を実現しました。この革新的なアプローチは、AI予測の理由を明確に理解し、具体的な分子設計ガイドラインを導き出すことで、材料開発における試行錯誤を大幅に削減します。これにより、高性能なAEM材料を迅速に特定し、実用化を加速します。

## 詳細

### 主要成果

九州大学の研究グループは、燃料電池や水電解槽の主要コンポーネントであるアニオン交換膜（AEM）材料の効率的な開発を可能にする、画期的な「ヒューマン・イン・ザ・ループ（Human-in-the-Loop, HITL）」フレームワークを開発しました。このフレームワークは、説明可能なAI（Explainable AI, XAI）、大規模言語モデル（LLM）の一つであるChatGPT、そして材料科学の専門知識を高度に融合させることで、AIの予測根拠を人間が理解し、設計プロセスに直接フィードバックできる新しい材料開発パラダイムを確立しました。

### 技術・臨床詳細

九州大学のHITLフレームワークは、以下の主要な要素を組み合わせることで機能します。

- **説明可能なAI (XAI):** 開発されたAIモデルは、AEM材料の構造と特性（例えば、イオン伝導性や化学的安定性）の間の関係を学習します。特筆すべきは、このAIが単に予測を出すだけでなく、「なぜその予測をしたのか」という根拠を、材料科学者が理解できる形で提示する能力を持つ点です。これにより、AIが特定の原子グループや分子構造がAEM材料の性能にどのように寄与するかを指し示します。
- **ChatGPTの活用:** ChatGPTのようなLLMは、XAIが提示する複雑なデータやパターンを、人間が直感的に理解しやすい自然言語のテキストに変換する役割を果たします。これにより、科学者は膨大な数のデータポイントや計算結果を詳細に分析することなく、重要な設計指針を素早く把握できます。また、ChatGPTは、過去の文献やデータベースから関連情報を抽出し、新たな設計アイデアの生成を支援することも可能です。
- **専門知識の統合:** 材料科学の専門家は、XAIとChatGPTが提供する情報に基づいて、AIの予測を検証し、自身の経験と知見を組み合わせ、より洗練された分子設計のアイデアを生成します。この人間の専門家による介入が、設計プロセスの信頼性を高め、予期せぬ問題の発見や、より創造的なソリューションの開発を可能にします。
- **クローズドループ学習:** 人間の専門家が改良した設計案は、再度AIモデルに入力され、新たな予測と実験計画に活用されます。この連続的なフィードバックループにより、AIモデルは継続的に学習し、AEM材料開発の効率が時間とともに向上します。

このアプローチにより、従来の試行錯誤に依存した材料開発サイクルを大幅に短縮し、数週間から数ヶ月で最適なAEM材料候補を特定できると期待されています。

## 背景・業界文脈

アニオン交換膜（AEM）は、燃料電池や水電解槽において、プロトン交換膜（PEM）の代替として注目されています。AEMは、高価な白金触媒を必要とせず、安価な非貴金属触媒の使用を可能にするため、次世代のクリーンエネルギー技術のコスト削減と普及に不可欠です。しかし、高イオン伝導性と長期的な安定性を両立するAEM材料の開発は、その分子設計の複雑さから大きな課題となっていました。九州大学のこの成果は、AIがもたらす予測能力と人間の深い専門知識を融合させることで、この困難な材料設計問題を効率的に解決し、クリーンエネルギー技術の社会実装を加速する可能性を秘めています。

## 今後の展望

九州大学が開発したHITLフレームワークは、AEM材料開発だけでなく、バッテリー材料、触媒、半導体など、他の複雑な機能性材料の設計にも応用できる汎用性を持っています。今後、研究グループは、フレームワークのさらなる高度化と、実験室でのロボットによる自動合成・特性評価システムとの連携を通じて、完全に自律的な材料発見プロセス「セルフドライビングラボ」の実現を目指すでしょう。この技術は、日本のマテリアルズ・インフォマティクス研究の国際的なリーダーシップを確立し、持続可能な社会の実現に向けた革新的な材料ソリューションの創出に大きく貢献することが期待されます。

元記事: <https://sjjst.go.jp/news/202606/n0618-01k.html>

# ベルリンでASCENDプロジェクトが3,000万ユーロの資金を獲得、触媒発見をAI主導の閉ループシステムで革新

公開日 2026年06月12日 EurekaAlert! ドイツ



## 概要

ベルリンで立ち上げられたASCENDプロジェクトは、3,000万ユーロの資金を獲得し、触媒発見に新たな時代をもたらします。このプロジェクトは、AIモデル、高スループット自動実験、材料特性評価、そして人間の専門知識を統合した閉ループのAI主導型発見システムへ移行することで、従来の試行錯誤型のアプローチを脱却します。これにより、触媒開発における試行錯誤を大幅に削減し、新触媒の実用化までのプロセスを劇的に加速することが期待されています。

## 詳細

### 主要成果

ベルリンで新たに発足したASCENDプロジェクトは、欧州の資金提供機関から3,000万ユーロ（約47億円）もの大規模な資金を獲得し、触媒発見の分野に革命をもたらすことを発表しました。このプロジェクトは、AIモデル、高スループット自動実験、高度な材料特性評価、そして人間の専門知識をシームレスに統合した「閉ループAI主導型発見システム」の構築を目指しており、従来の試行錯誤に依存した触媒開発プロセスを根本的に変革するものです。

### 技術・臨床詳細

ASCENDプロジェクトの中核は、以下の主要な要素を組み合わせた革新的なワークフローにあります。

- **AIモデルによる設計と予測:** 大規模な触媒データセットから学習したAIモデルが、特定の反応条件や目標特性（例：活性、選択性、安定性）に基づいて、新しい触媒組成や構造を予測・設計します。特に生成AI技術を活用し、人間が思いつかないような有望な候補を提案します。
- **高スループット自動実験:** AIが提案した触媒候補は、ロボットアームやマイクロ流体システムを用いた自動化されたラボ環境で、迅速に合成およびテストされます。これにより、一度に数千種類の触媒を並行して評価することが可能となり、実験のスループットが劇的に向上します。
- **高度な材料特性評価:** 合成・テストされた触媒は、X線回折、電子顕微鏡、分光法など、最先端の分析機器を用いて詳細に特性評価されます。これらのデータは即座にデジタル化され、AIモデルの学習データセットに追加されます。
- **閉ループフィードバックと学習:** 特性評価によって得られたデータは、AIモデルにリアルタイムでフィードバックされ、次の設計・実験ラウンドに活用されます。この連続的な学習サイクルにより、AIモデルは時間とともに性能を向上させ、より効率的に最適な触媒を探索できるようになります。
- **人間の専門知識の統合:** システムは完全な自動化を目指しつつも、人間の触媒化学者やエンジニアの深い専門知識が、AIモデルの検証、複雑な問題解決、そして新たな科学的洞察の創出において重要な役割を果たします。

この統合されたアプローチにより、触媒開発にかかる時間とコストを大幅に削減し、これまで数年から数十年を要していたプロセスを数ヶ月へと短縮する可能性を秘めています。

## 背景・業界文脈

触媒は、化学産業、エネルギー変換（燃料電池、水素製造）、環境保護（排ガス浄化、CO2回収）など、現代社会の持続可能性と経済効率に不可欠な役割を担っています。しかし、新しい高性能触媒の発見と最適化は、その複雑な組成と反応メカニズムのため、極めて困難で時間のかかる作業でした。欧州連合（EU）は、グリーンディール目標達成のために、革新的な触媒技術の迅速な開発を重要な優先事項として掲げています。ASCENDプロジェクトへの3,000万ユーロの資金提供は、この戦略的必要性を反映しており、AI駆動型触媒発見が欧州の研究開発における主要な柱になりつつあることを示しています。

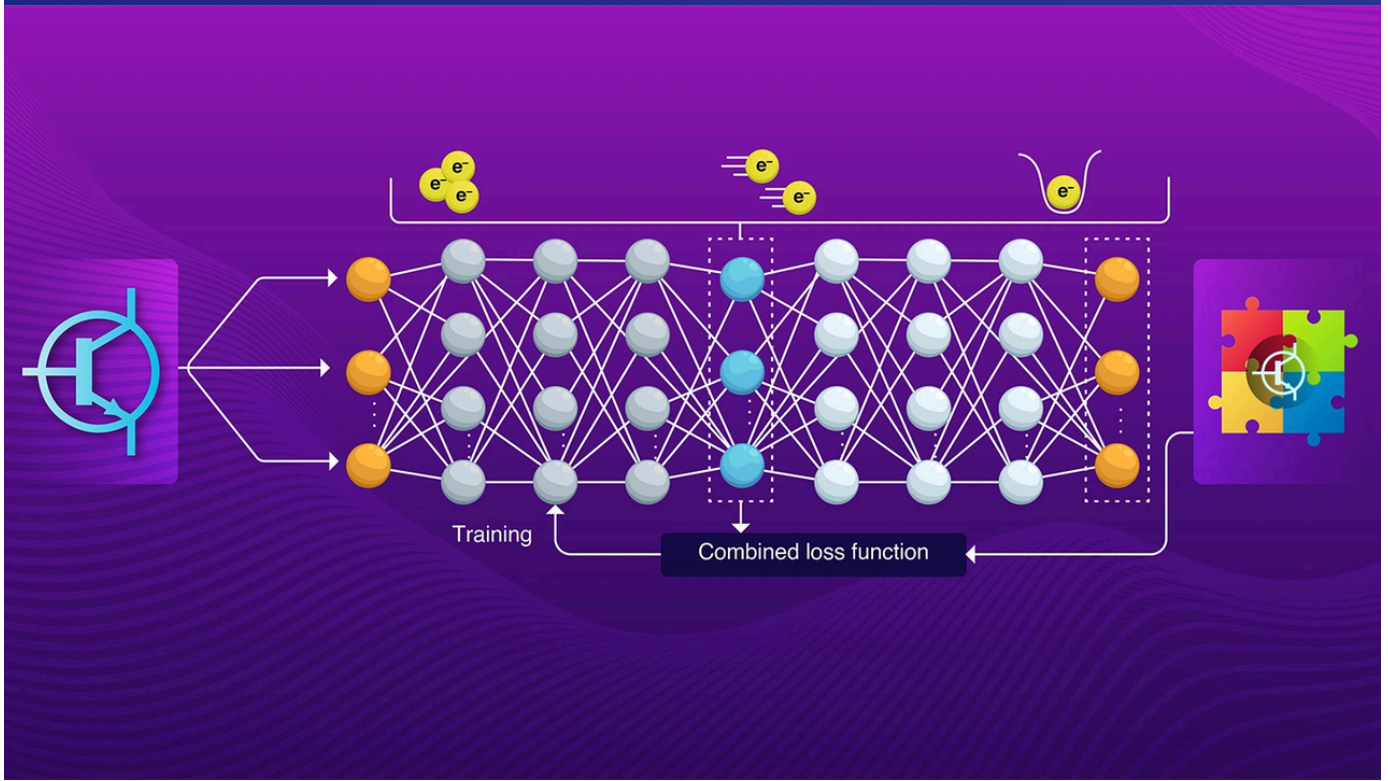
## 今後の展望

ASCENDプロジェクトは、触媒発見の未来を形作る上で大きな影響を与えるでしょう。今後、この閉ループAI主導型システムは、自動車排ガス浄化触媒、バイオ燃料製造触媒、プラスチックリサイクル触媒など、具体的な産業応用に向けて展開されることが期待されます。また、このプラットフォームで得られた知見は、触媒設計の一般的な原則を確立し、他の材料科学分野にも波及効果をもたらすでしょう。ASCENDの成功は、欧州がAIと自動化を活用して、持続可能な化学産業とクリーンエネルギーへの移行を加速するための、強力なモデルとなることが予測されます。

元記事: <https://www.eurekaalert.org/news-releases/1131979>

# 東京科学大学、半導体解析の逆問題を1ミリ秒未満で解決するタンデムニューラルネットワークを開発

公開日 2026年06月18日 東京科学大学 日本



## 概要

東京科学大学の研究チームは、半導体解析における複雑な逆問題を1ミリ秒未満で解決できるタンデムニューラルネットワークを開発しました。この画期的なAIシステムは、トランジスタ測定値から半導体材料の物理パラメータをリアルタイムで推論し、従来数時間から数日かかっていた解析を劇的に高速化します。これにより、半導体製造ラインでのリアルタイム品質チェックや、自律型研究システムへの応用が期待され、半導体産業のR&Dおよび製造効率を大きく向上させます。

## 詳細

### 主要成果

東京科学大学の研究チームは、半導体デバイスの解析において長年の課題であった「逆問題」を、驚異的な速度で解決するタンデムニューラルネットワークを開発しました。このAIシステムは、トランジスタの電氣的測定値から、その内部にある半導体材料の物理パラメータ（例：不純物濃度、移動度、膜厚など）を1ミリ秒未満で正確に推論することが可能です。これにより、従来数時間から数日を要していた複雑な解析がリアルタイムで行えるようになり、半導体R&Dおよび製造における革新的な効率向上を実現します。

### 技術・臨床詳細

半導体デバイスの逆問題とは、デバイスの外部から測定可能な電気信号（順方向電圧、電流-電圧特性など）から、そのデバイスを構成する材料のミクロな特性を推論する課題です。この問題は、多くの入力と同じ出力を生み出す可能性がある「多値性（multi-valuedness）」という特性のため、非常に解くのが困難でした。東京科学大学が開発したタンデムニューラルネットワークは、この多値性問題に対処するために、二つのニューラルネットワークを直列に接続した独自のアーキテクチャを採用しています。第一のネットワークは、測定値から複数の可能な材料パラメータのセットを提案し、第二のネットワークがそれらのセットの中から最も物理的に妥当な解を選択・精緻化します。このアーキテクチャにより、AIは高い信頼性で逆問題を解決できるようになります。実験では、様々なトランジスタ構造と材料パラメータを持つ仮想デバイスを用いて訓練され、実際の測定データに近いノイズ環境下でも、物理パラメータを数パーセントの誤差範囲内で正確に推定できることが示されました。この「サブミリ秒」の応答速度は、現代の半導体製造ラインにおけるインライン品質管理や、材料開発の自律化において決定的な優位性をもたらします。

## 背景・業界文脈

半導体産業は、ムーアの法則に代表されるように、絶え間ない微細化と高性能化を追求してきました。しかし、デバイス構造が複雑化し、材料の種類が増えるにつれて、製造プロセスの制御と品質管理はますます困難になっています。特に、製造されたデバイスの性能が設計目標から外れた場合、その原因を材料特性に遡って特定する逆問題の解決は、迅速な歩留まり改善とコスト削減に不可欠です。これまでの逆問題解析は、専門家による経験的判断や、計算負荷の高いシミュレーションと最適化手法に依存しており、時間がかかりすぎていました。東京科学大学のこの成果は、AIと機械学習が半導体製造のボトルネックを解消し、次世代デバイス開発を加速する強力なツールとなり得ることを示しています。これは、日本が半導体技術分野で再び競争力を高める上での重要な技術的ブレークスルーです。

## 今後の展望

このタンデムニューラルネットワークは、半導体産業のR&Dおよび製造プロセスに大きな変革をもたらす可能性を秘めています。今後、この技術は、より多様な半導体デバイス（例：高出力デバイス、光電子デバイス）や、新しい材料（例：ワイドバンドギャップ半導体、二次元材料）の解析に応用されることが期待されます。また、このAIシステムを、自動化されたプロセス制御システムや「セルフドライビングラボ」に統合することで、完全に自律的な半導体材料の開発・製造サイクルを実現する基礎となるでしょう。長期的には、この技術が、半導体デバイスの設計サイクルを短縮し、製造コストを削減し、製品品質と信頼性を向上させることで、AI/IoT、5G/6G、量子コンピューティングといった次世代技術の発展を強力に下支えすることが予測されます。

元記事: <https://www.isct.ac.jp/en/news/tky57fxj4rub>

# AtomGPT.orgがオープンアクセス型エージェントAIプラットフォーム「AGAPI-Agents」を発表、材料設計を加速

公開日 2026年06月17日 The Journal of Physical Chemistry Letters アメリカ



## 概要

AtomGPT.orgは、オープンソースの大規模言語モデル（LLMs）と科学ツール・データベースを統合した、オープンアクセス型のエージェントAIプラットフォーム「AGAPI-Agents」を発表しました。このプラットフォームは、ツール拡張がエージェント型材料AIにとって極めて重要であることを評価し、特にパラメトリックなLLM知識が限られている領域において、予測精度と自律的なワークフローオーケストレーションを向上させます。これにより、材料設計のプロセスが加速し、研究開発の効率が劇的に改善されると期待されます。

## 詳細

### 主要成果

AtomGPT.orgは、化学および材料科学分野向けに設計されたオープンアクセス型のエージェントAIプラットフォーム「AGAPI-Agents」を発表しました。このプラットフォームは、オープンソースの大規模言語モデル（LLMs）を様々な科学ツールや材料データベースと統合することで、材料設計プロセスを劇的に加速することを目的としています。AGAPI-Agentsは、特にLLMの内部知識だけでは不足するような複雑な材料探索タスクにおいて、外部ツールとの連携（ツール拡張）が予測精度と自律的ワークフローのオーケストレーションを向上させる上で極めて重要であることを実証しました。

### 技術・臨床詳細

AGAPI-Agentsは、以下の主要な要素を統合しています。

- **オープンソースLLMの活用:** 基盤となるのは、化学・材料科学に関する膨大なテキストデータで学習されたオープンソースのLLMです。これにより、研究者は自由にモデルをカスタマイズし、特定の研究課題に適用できます。
- **科学ツールとデータベースの統合:** AGAPI-Agentsは、密度汎関数理論（DFT）計算パッケージ、分子動力学シミュレーションツール、材料物性データベース（例：Materials Project）、合成経路予測ツールなど、様々な専門的な科学ツールやデータベースとシームレスに連携します。LLMは、これらの外部ツールを適切なタイミングで呼び出し、その出力を解釈して次のステップを決定する「エージェント」として機能します。
- **エージェント型ワークフロー:** LLMは、材料設計の目標を理解し、仮説生成、実験計画、データ分析、結果解釈といった一連のタスクを自律的にオーケストレーションします。このエージェント型アプローチにより、人間の介入を最小限に抑えつつ、発見から設計、最適化までのプロセス全体を高速化します。
- **ツール拡張による性能向上:** 研究では、パラメトリックなLLM知識だけでは困難な、複雑な材料特性の予測や逆設計タスクにおいて、外部ツールへのアクセスと活用がモデルの性能を劇的に向上させることが示されました。例えば、正確なエネルギー計算にはDFTツールを、結晶構造の探索にはデータベースを、といった具合に、タスクに応じて最適なツールを使い分けます。

AGAPI-Agentsは、材料科学者が自身の研究課題に特化した高性能AIエージェントを迅速に構築できる、強力なフレームワークを提供します。

## 背景・業界文脈

材料科学分野では、新しい機能性材料の発見と開発が、エネルギー、環境、医療、情報技術といった多くの産業の進歩を支える鍵となります。しかし、材料設計の複雑さと探索空間の広大さから、従来の研究開発は時間とコストがかかるプロセスでした。LLMの登場は、科学文献からの知識抽出と新しいアイデア生成の可能性を開きましたが、その「ブラックボックス」性や、最新の実験データや高精度なシミュレーションツールとの連携不足が課題とされてきました。AGAPI-Agentsのようなオープンアクセス型プラットフォームは、LLMの能力を科学的ツールと統合することで、これらの課題を克服し、マテリアルズ・インフォマティクス研究の民主化と加速を促進します。

## 今後の展望

AGAPI-Agentsは、材料設計の未来を形作る上で極めて重要なツールとなるでしょう。今後、このプラットフォームは、さらに多様な科学ツールや実験室でのロボットによる自動合成・特性評価システム（セルフドライビングラボ）との連携を通じて、完全に自律的な「AI駆動型材料発見ラボ」の実現に貢献することが期待されます。また、プラットフォームのユーザーコミュニティが拡大することで、新たな材料設計アルゴリズムやツールが次々と生み出され、オープンサイエンスの精神に基づいたイノベーションが加速するでしょう。この技術は、持続可能な社会の実現に向けた革新的な材料ソリューションの創出を、これまでにはない速度と効率で推進すると予測されます。

元記事: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcllett.6c00837>

# パデュー大学、計算材料設計およびマテリアルズインフォマティクス分野でポスドク研究員を募集、DFT・MLIPs研究を強化

公開日 2026年06月18日 ApplyKite アメリカ



## 概要

パデュー大学は、計算材料設計とマテリアルズインフォマティクス分野でポスドク研究員の募集を開始しました。このポジションは、密度汎関数理論 (DFT)、欠陥シミュレーション、機械学習分子間ポテンシャル (MLIPs) といった原子シミュレーション手法や、データ駆動型AIアプローチを専門とする研究者を対象としています。この戦略的採用は、先進材料科学における同大学の研究能力を強化し、新材料の発見と最適化を加速することを目的としています。

## 詳細

### 主要成果

パデュー大学は、計算材料設計およびマテリアルズインフォマティクス分野における研究能力を強化するため、ポスドク研究員の募集を開始しました。この戦略的な採用は、密度汎関数理論（DFT）、欠陥シミュレーション、および機械学習分子間ポテンシャル（MLIPs）などの最先端の原子シミュレーション手法に精通し、データ駆動型AIアプローチを活用できる研究者を対象としています。これにより、同大学は、新材料の発見と既存材料の最適化の加速を目指します。

### 技術・臨床詳細

募集ポジションの研究テーマは、以下のような技術領域に焦点を当てています。

- **密度汎関数理論（DFT）**：材料の電子構造や物理化学的特性を第一原理的に計算する手法であり、原子レベルでの詳細な理解を提供します。これは、新しい材料設計のための基礎データ生成に不可欠です。
- **欠陥シミュレーション**：材料の結晶構造に存在する点欠陥、線欠陥、面欠陥などが、材料の機械的、電気的、光学的特性に与える影響をシミュレーションを通じて解明します。これにより、材料の信頼性と性能を向上させるための指針が得られます。
- **機械学習分子間ポテンシャル（MLIPs）**：DFT計算データを訓練データとして、原子間相互作用を高速かつ高精度で予測する機械学習モデル。MLIPsは、大規模な分子動力学シミュレーションを可能にし、材料の長期的な挙動や相転移、拡散現象などを探求する上で極めて重要です。
- **データ駆動型AIアプローチ**：材料データベースから新しいパターンや関係性を抽出し、新材料候補の生成、特性予測、実験計画の最適化などにAIを活用します。グラフニューラルネットワーク（GNN）やベイズ最適化などの先端手法が用いられます。

これらの手法を組み合わせることで、研究者は、エネルギー材料、半導体、構造材料、触媒など、幅広い応用分野における新材料の設計と開発を加速することが可能になります。

## 背景・業界文脈

現代社会の技術革新は、高性能な新材料の発見に大きく依存しています。しかし、従来の材料研究開発は、多大な時間と費用がかかる試行錯誤に大きく依存してきました。マテリアルズインフォマティクスは、計算科学、データ科学、AIを統合することで、このボトルネックを打破し、材料発見の効率を劇的に向上させるパラダイムとして注目されています。パデュー大学のような主要研究機関が、この分野でトップクラスの人材を積極的に誘致することは、学術研究の最前線を推進し、米国の科学技術的リーダーシップを維持するための重要な戦略です。このような投資は、学術界における研究能力の深化だけでなく、産業界への技術移転とイノベーション創出にも貢献します。

## 今後の展望

このポスドク研究員募集は、パデュー大学が計算材料科学とマテリアルズインフォマティクスの分野で、今後数年間にわたり主導的な役割を果たすためのコミットメントを示しています。採用される研究者は、これらの先端技術を駆使して、エネルギー効率の高い材料、持続可能な製造プロセス、次世代電子デバイスなど、社会が直面する大きな課題に対する革新的な材料ソリューションの創出に貢献するでしょう。将来的には、これらの研究成果が、産学連携プロジェクトを通じて実際の製品開発に結びつき、産業界に大きな影響を与えることが期待されます。また、AIとシミュレーション技術の融合は、材料研究開発の「セルフドライビングラボ」の実現に向けた重要なステップとなるでしょう。

---

元記事: <https://www.applykite.com/positions/postdoctoral-researcher-opening-in-computational-materials-design-and-materials-informatics-e4qwqs2xcg>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)

# SchubertグループがAI4X会議でAI駆動型ポリマー研究を発表、高分子材料発見を加速

公開日 2026年06月18日 不明 ドイツ



## 概要

Schubertグループは、シンガポールで開催されたAI4X Conference 2026で、AI駆動型ポリマー研究の最新進捗を発表しました。彼らの研究は、自動化、高スループット実験、機械学習が新しい機能性ポリマー材料の発見をいかに加速するかを強調しています。大規模なポリマーデータセットの効率的な生成と分析、そして構造と特性の関係に関する深い洞察を通じて、これまで以上に迅速な材料発見が可能になることを示し、産業界での高分子材料開発に革新をもたらします。

## 詳細

### 主要成果

Schubertグループは、シンガポールで開催されたAI4X Conference 2026において、AI駆動型ポリマー研究における最新の画期的な進歩を発表しました。彼らの研究は、自動化された高スループット実験と機械学習を組み合わせることで、新しい機能性ポリマー材料の発見プロセスが劇的に加速されることを実証しています。これにより、大規模なポリマーデータセットの効率的な生成と分析が可能となり、ポリマーの構造と特性の間の複雑な関係性に関する深い洞察が得られることが示されました。

### 技術・臨床詳細

Schubertグループの研究は、以下の主要な要素を統合しています。

- **高スループット自動合成:** ロボットによる自動化された合成プラットフォームを利用して、幅広い組成と構造を持つポリマーを高速で合成します。これにより、従来のラボスケールでは不可能だった、数千種類のポリマー候補の同時生成が可能になります。
- **自動特性評価:** 合成されたポリマーは、様々な物理的・化学的特性評価（例：熱分析、粘度測定、機械的強度試験、光学特性評価）を自動で行う装置によって迅速に評価されます。これらの測定データは即座にデジタル化され、データベースに格納されます。
- **機械学習モデル:** 収集された構造-特性データは、機械学習モデル（例：回帰モデル、分類モデル、生成モデル）の訓練に使用されます。これらのモデルは、ポリマーの構造がその機能性（例：電気伝導性、生体適合性、耐熱性）にどのように影響するかを学習し、新しいポリマー候補の特性を予測したり、望ましい特性を持つポリマーを逆設計したりします。特に、分子構造をグラフとして扱うグラフニューラルネットワーク（GNN）が、複雑な高分子の予測に有効性を発揮します。
- **クローズドループ学習:** 機械学習モデルの予測は、次の自動合成・特性評価の実験計画にフィードバックされ、この連続的な学習サイクルにより、ポリマー発見の効率が時間とともに継続的に向上します。

この統合されたアプローチにより、従来の数年から数十年かかっていた新しいポリマー材料の開発を、数ヶ月単位に短縮することが可能になります。

## 背景・業界文脈

ポリマー材料は、自動車、航空宇宙、医療、エレクトロニクス、包装など、あらゆる産業で不可欠な素材です。しかし、新しい機能性や持続可能性を持つポリマーの開発は、その広大な化学空間と複雑な合成経路のため、極めて困難で時間のかかる課題でした。AIと自動化技術の進歩は、このポリマー科学における「探索のボトルネック」を打破する強力な手段として注目されています。Schubertグループの発表は、マテリアルズ・インフォマティクスがポリマー分野にもたらす変革の可能性を具体的に示しており、より高性能で環境に優しい高分子材料の迅速な創出への期待を高めています。

## 今後の展望

Schubertグループの研究は、AI駆動型ポリマー研究の未来を形作る上で重要な役割を果たすでしょう。今後、このアプローチは、より複雑な多機能性ポリマー、自己修復ポリマー、リサイクル可能な生分解性ポリマーなど、幅広い種類の高分子材料に応用されることが期待されます。また、AIモデルの予測精度と、自動合成・特性評価システムの信頼性をさらに向上させ、人間による介入を最小限に抑えた「セルフドライビングラボ」の実現を目指すでしょう。この技術は、持続可能な社会の実現、循環型経済への移行、そして新興技術分野における革新的な製品開発に不可欠な、次世代のポリマー材料を迅速に提供することが予測されます。

---

元記事: <https://www.chemgeo.uni-jena.de/en/70015/ai-driven-polymer-research-from-the-schubert-group-presented-at-ai4x-conference-2026>

収集日: 2026年06月19日 | 自動記事収集・翻訳システム (Gemini API使用)