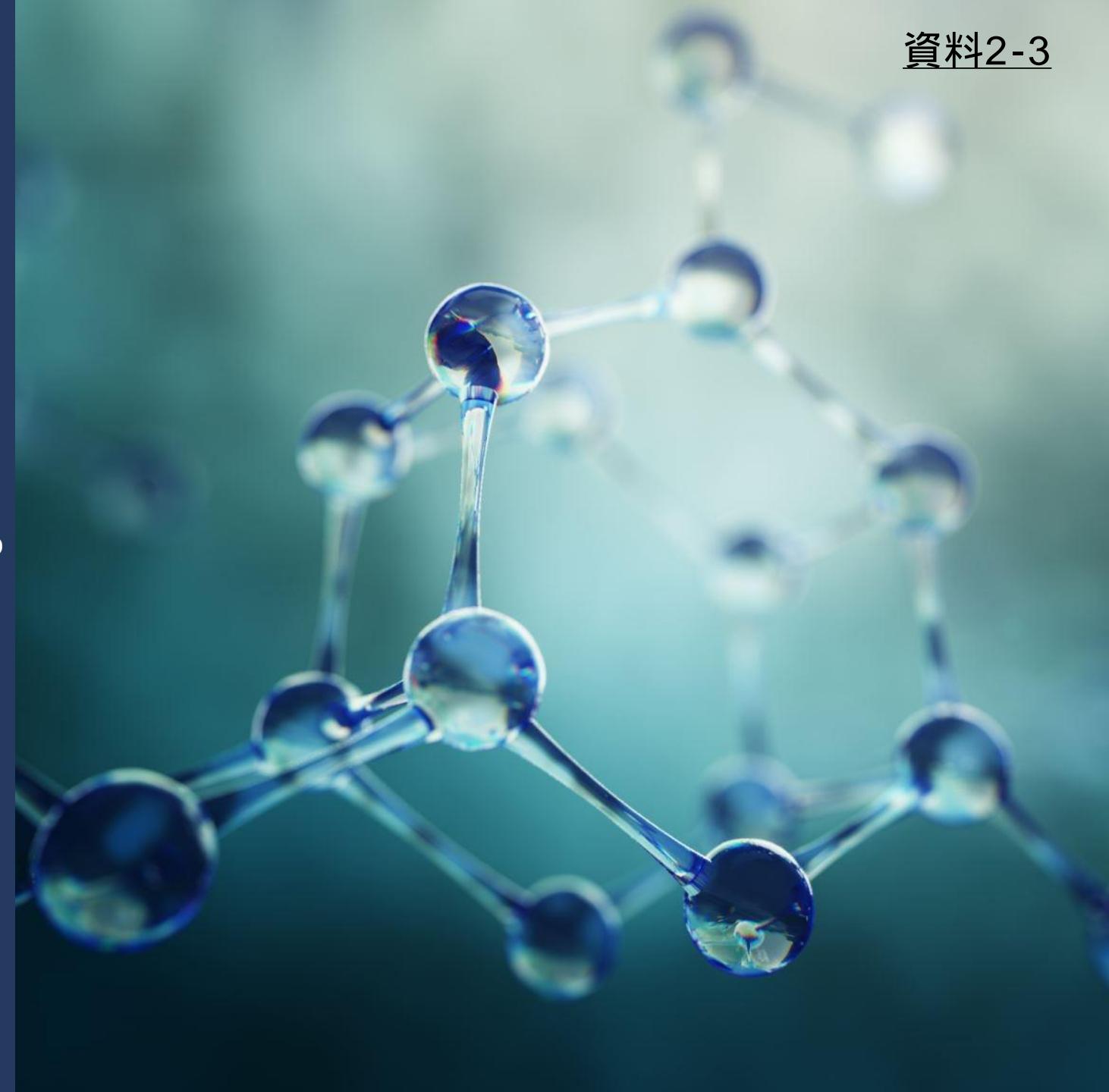




マテリアル領域における AIエージェントの活用例

Accelerating Innovation in Chemicals / Materials Science R&D

2025年12月 8日
日本マイクロソフト株式会社



Microsoftの目標

Microsoftは、科学領域での革新は、最もインパクトが大きくエキサイティングなAI適用領域と捉え、特に注力しています

“我々の目標は、
250 年分の化学と材料科学の
進歩を 25 年に圧縮し、
科学的発見を加速することです”

Satya Nadella



Contents

- 事例
- 革新を支える構成要素
- Microsoftの科学プラットフォーム概要

AIエージェントによる素材開発のブレークスルーは既に始まっている

素材開発



Pacific Northwest NATIONAL LABORATORY

リチウムを7割削減した全固体電池材料を開発

- ✓ 新素材候補の特定 : 1週間
- ✓ プロトタイプ作成 : 9カ月未満

消費財 開発



Unilever

様々な顧客ニーズを満たす商品をスピーディに開発

- ・ヘアケア・スキンケア
- ・各種洗浄剤
- など

新たな全固体電池用の素材をわずか一週間で開発



1 H	Hydrogen
3 Li	Lithium
4 Be	Boron
11 Na	Sodium
12 Mg	Magnesium
19 K	Potassium
20 Ca	Calcium
21 Sc	Scandium
22 Ti	Titanium
23 V	Vanadium
24 Cr	Chromium
25 Mn	Manganese
26 Fe	Iron
27 Co	Cobalt
28 Ni	Nickel
29 Cu	Copper
30 Zn	Zinc
31 Ga	Gallium
32 Ge	Germanium
33 As	Antimony
34 Se	Selenium
35 Br	Bromine
36 Cd	Cadmium
48 In	Inium
50 Sn	Tin
51 Sb	Sbium
52 Te	Tellurium
81 Tl	Thallium
82 Pb	Pbium
83 Bi	Bismuth
72 Hf	Hafnium
73 Ta	Tantalum
74 W	Tungsten
75 Re	Rhenium
55 Cs	Cesium
56 Ba	Boron

32,600,000

500,000

800

150

18

1



知見整理と仮説構築

論文等 先行研究を調査し、既存の知見整理と仮説立案

材料科学を学習させたAIモデルによる 大規模探索空間生成

結晶構造中の関連元素置換により、材料候補を生成

AIによる
推論

AIによる高速スクリーニングと HPCシミュレーション

材料安定性評価と 物理シミュレーションにより絞り込み

AIによる
推論

DFTベースの高度物理シミュレーション

詳細物理シミュレーションにて性能・構造・特性等静的評価

HPC

スクリーニング
シミュレーション

MDシミュレーション on HPC

耐久性・界面特性など動的・時間依存特性から評価

専門家の知見に
に基づく検証

専門家の知見に基づく評価

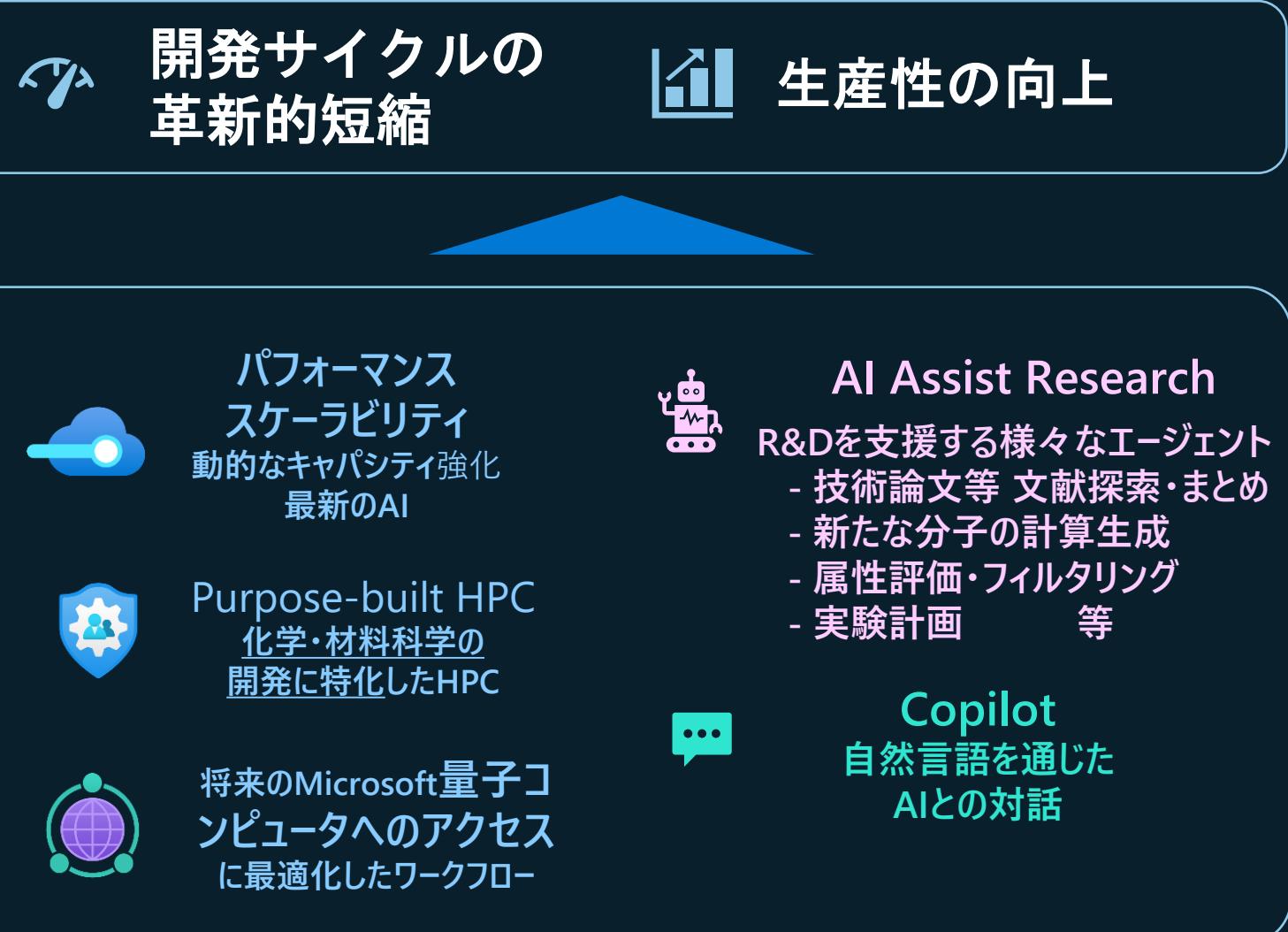
新規性/入手可能性/コスト等の評価

イノベーションの
加速

新たな電解質

既存の固体電解質よりリチウム使用量が少ない電解質

2種類のエージェント、データ基盤と高速コンピューティングが革新を支える



エージェントの一例： Generative Chemistry

新しく、かつ用途適合性と
合成のフィジビリティが高い分子を提示

- 生成AIを活用しこれまでにない分子を示唆
 - 既知の分子化合物は数億種類にとどまる
 - 10の60乗の原子の組合せから特定用途に適した候補分子を生成し研究者に提示
- AIで候補分子の特性を予測し、用途適合性を評価
(AIモデルのチューニングも可能)
- 更に、候補分子が妥当なステップ数で合成可能か
も評価



対局にあるアプローチ

- 過去に研究された既知の分子群からの絞り込み
- 「データベース」から化合物を特定

[Introducing two powerful new capabilities in Azure Quantum Elements: Generative Chemistry and Accelerated DFT - Microsoft Azure Quantum Blog](#)

エージェントの一例： Science Copilot

STEP1: 既存の知見の調査とまとめ

I want to identify novel immersion coolants for data centers focusing on minimizing electricity consumption and that are not harmful for the environment.
What would be known molecules that could be used as seeds to identify new ones?
Create a report on the latest research in this domain and the key properties they should meet.

Analyzing

**PFASを含まない新たな冷却液を開発したい。
Seedsとなり得る物質を確認し関連情報を調査してレポートにまとめて**

Immersion Coolants for Data Centers

Report: Novel Immersion Coolants for Energy-Efficient Data Centers (Non-PFAS)

Prepared for: Evaluation of immersion cooling fluids that minimize electricity consumption and exclude PFAS (per- and polyfluorochemical substances)

Scope: Latest research developments, key coolant properties, PFAS concerns, alternative substances, and candidate molecules for generative model seeding.

Introduction

Data centers are facing escalating cooling demands due to high-density computing (e.g. AI workloads and cloud services). Traditional air cooling is reaching its limits in efficiency and energy use, with cooling systems accounting for up to 40% of data center energy consumption [1]. Immersion cooling – submerging servers in dielectric liquid -- has 3 advanced immersion 3% overheat beyond IT power power draw and operational

当該ドメインの最新情報と、
Seeds化合物の推論をまとめた
リサーチレポート（左）と参照情報（右）

STEP 2: 仮説立案

このレポートにあるSeeds 分子群から
以下の要件を満たすものを計算生成して

1 沸点 25~65度
2 密度 < 2000 kg/m³
3. 誘電率 < 6

Analyzing

The full report has been generated. Would you like assistance or additional analysis?

Stop Execution

Message Copilot

All-generated content may be incorrect

High-Dielectric Strength & Electrical Resistivity: Since electronics are directly immersed, the fluid must be an excellent electrical insulator. High dielectric strength withstands high voltages without breakdown and high resistivity prevent any current leakage or short circuit. While these don't directly reduce cooling energy, they are non-negotiable safety properties. Essentially all immersion fluids, whether oil or fluorocarbon, have very low conductivity (typically resistivity >10¹² ohm-cm and dielectric breakdown voltage in the tens of kV range) [3]. This allows components to operate reliably while submerged. A fluid that maintains these insulating properties over

High Heat Capacity & Thermal Conductivity: Since heat transfer is critical for efficient cooling, a high heat capacity allows the fluid to absorb more heat per unit mass. Thermal conductivity determines how easily heat can be transferred from hot components to the bulk fluid. A higher thermal conductivity allows for faster heat removal, reducing the temperature difference between the hot component and the bulk fluid. For example, a typical hydrocarbon oil has a specific heat of ~2.3 kJ/kg and thermal conductivity ~0.14 W/mK, which are relatively high compared to dense fluorinated fluids (immersion liquids often have ~1.14 J/kg·K at 0–11 °C).

Generated Candidate Molecules

1. Generated Candidate Molecules Using seed molecules from the report, a set of candidate molecules was generated. These molecules are likely to have the required properties for use as seeds for generative AI models. They include various organic compounds such as alkanes, alkenes, and aromatic hydrocarbons, as well as some inorganic salts and minerals.

研究者がコードを書くことなくワークフローが作成され、適切なAIモデルがHPC上で実行されて化合物の候補が生成される

- 候補生成
- 規制を考慮しフィルタリング
- 沸点、誘電率等の計算

Microsoft Discovery : Microsoftの サイエンス・プラットフォーム

エージェント技術を用いた各種ツールやAIモデルを、誰でも安全に使いこなせるように推論や知識ソースと共にプラットフォーム化

Science Copilot

データ解析から計算ワークフローの計画・実行まで、様々な専門エージェントを自律的に
オーケストレーションする科学に特化したAIアシスタント

Copilot as the common Platform UX

Agentic Framework

Multi-party collaboration & M365 Integration

Science Supercomputer

計算ワークフロー
実行基盤

HPC as a Service
Managed Workflows
AI Model Hosting & Inference
Security & Isolation

Science Bookshelf

Copilotが推論処理や
知識参照に用いるデータ基盤

Curated Knowledge Bases
(Public, Paywalled, Proprietary)
Discovery Engine

Science Catalog

計算ワークフローの構築・実行を
支える各種ソフトウェア、
ツールとAIモデル群

Computational tools
AI/ML models
Visualization tools

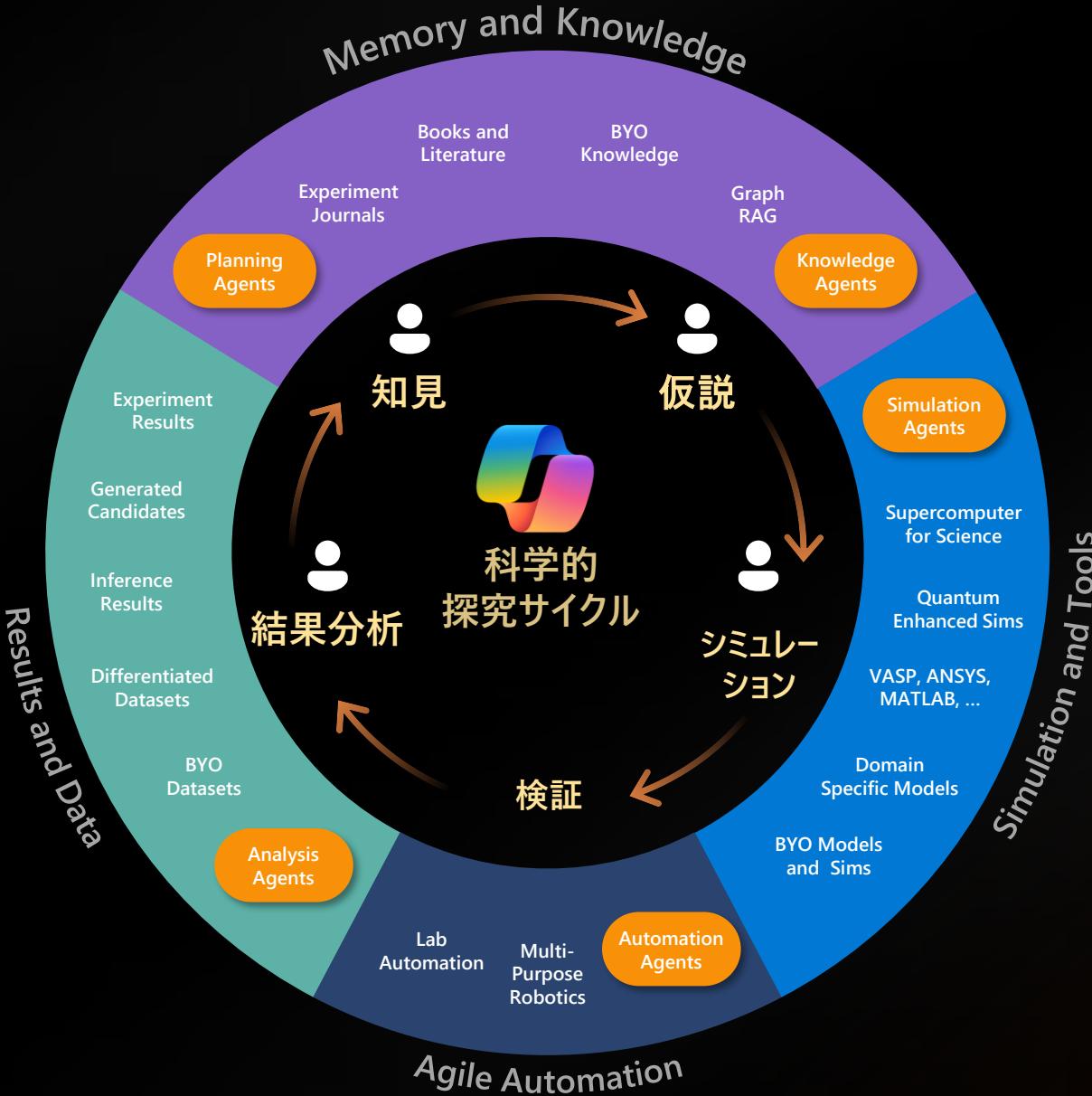
Extensibility

特定用途に合わせ
追加のツール・AIモデ
ル、ならびに知識
ベースを取り込む

BYO tools & models
(custom + OSS)
Marketplace for 3P
solutions

現時点ではPrivate Previewとして グローバル数社のお客様にのみご提供・検証中。今後 一般公開を予定。

エージェントで探究サイクルを超高速化し、革新的な素材開発を加速



■ エージェントで科学の探究サイクルを高速化

- 仮説立案、新たな候補の生成、シミュレーション、検証、知見化
- 分子設計、材料評価、プロセスパラメータの解析
- 科学に特化した“コパイロット”

✓ 最先端の技術を全ての研究者の手に

- 自然言語
- ツールのリテラシーは重要ではない

✓ プロセスや組織サイロを解消

- データ/知識
- ツール/AIモデル

✓ 知的資産とコンプライアンスの管理を徹底



Thank you