



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



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



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

1 H Hydrogen																	
3 Li Lithium	4 Be Beryllium																
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 Arsenic	34 Se Selenium	35 Br Bromine	
37 Rb Rubidium	38 Sr Strontium	39 Y Yttrium	40 Zr Zirconium	41 Nb Niobium	42 Mo Molybdenum							48 Cd Cadmium	49 In Indium	50 Sn Tin	51 Sb Antimony	52 Te Tellurium	53 I Iodine
55 Cs Cesium	56 Ba Barium	72 Hf Hafnium	73 Ta Tantalum	74 W Tungsten	75 Re Rhenium							81 Tl Thallium	82 Pb Lead	83 Bi Bismuth			



知見整理と仮説構築

AIによる 推論

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

HPC リーニング レーション

DFTベースの高度物理シミュレーション

専門家の知見に
基づく検証

MDシミュレーション on HPC

イノベーションの 加速

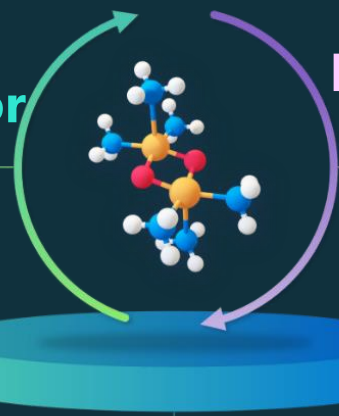
専門家の知見に基づく評価

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

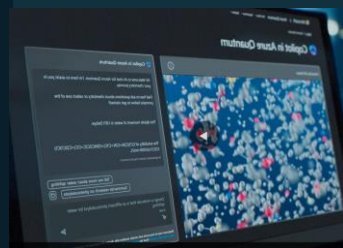
2 種類のエージェント、データ基盤と高速コンピューティングが革新を支える

Orchestrator
Agent



Research &
Discovery
Agent

Data Platform、Security
Cloud HPC/ Quantum(将来)



開発サイクルの
革新的短縮



生産性の向上



パフォーマンス
スケーラビリティ
動的なキャパシティ強化
最新のAI



Purpose-built HPC
化学・材料科学の
開発に特化したHPC



将来のMicrosoft量子コ
ンピュータへのアクセス
に最適化したワークフロー



AI Assist Research

R&Dを支援する様々なエージェント
- 技術論文等 文献探索・まとめ
- 新たな分子の計算生成
- 属性評価・フィルタリング
- 実験計画 等



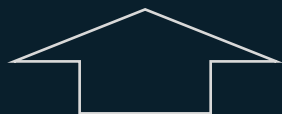
Copilot

自然言語を通じた
AIとの対話

エージェントの一例： Generative Chemistry

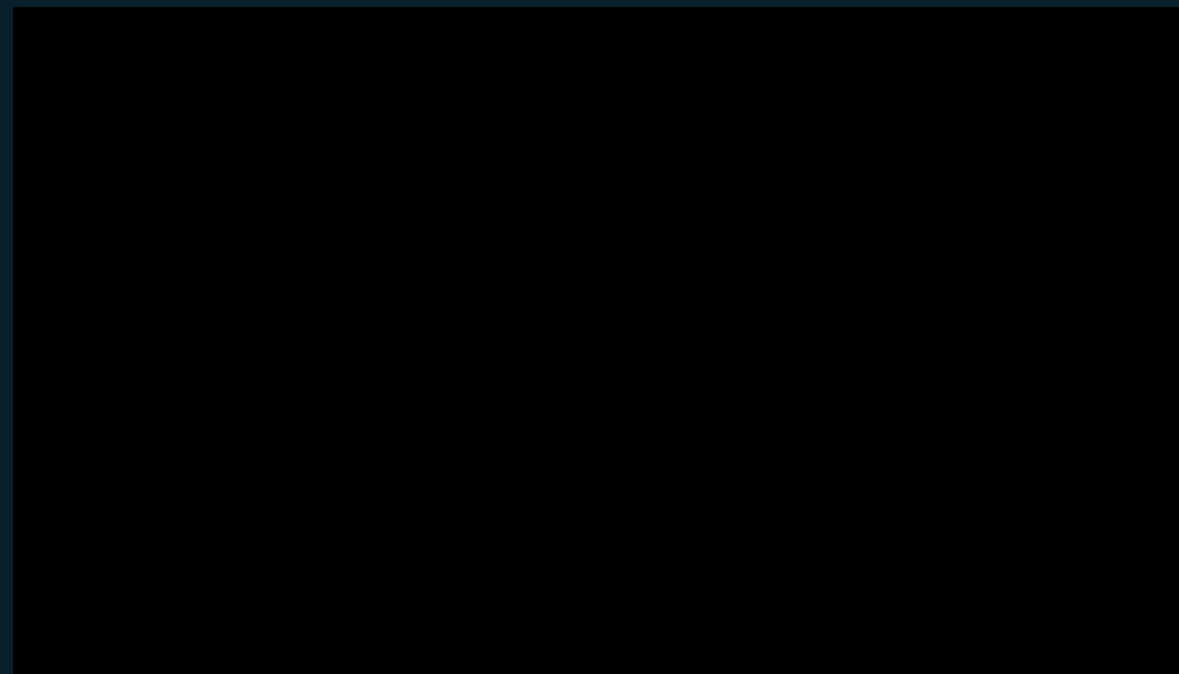
新しく、かつ用途適合性と 合成のフィージビリティが高い分子を提示

- 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

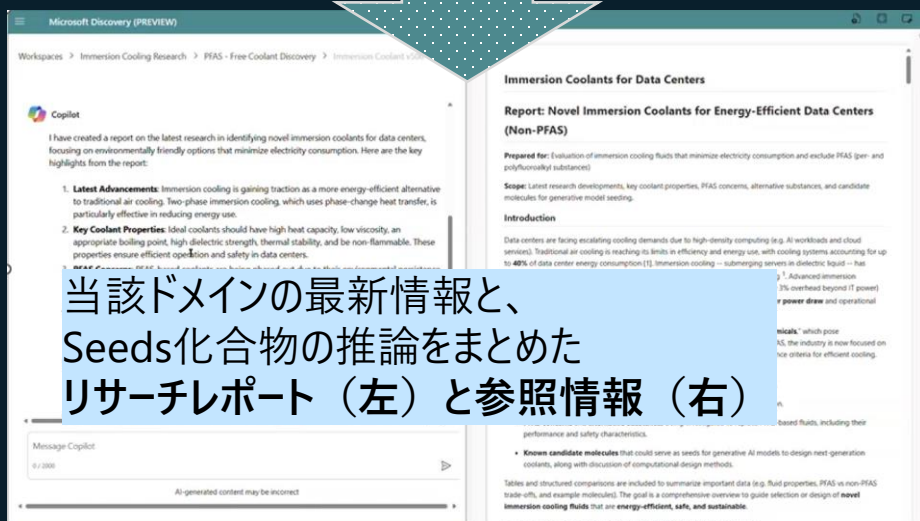
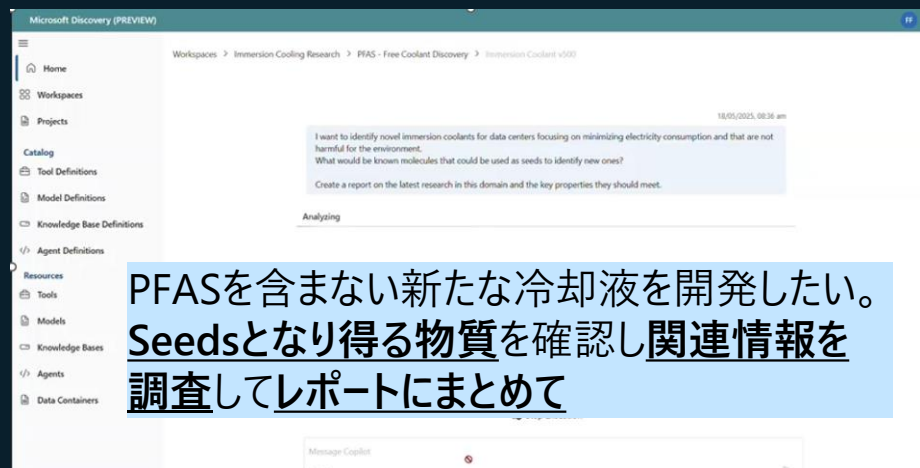
- 過去に研究された既知の分子群からの絞り込み
- 「データベース」から化合物を特定



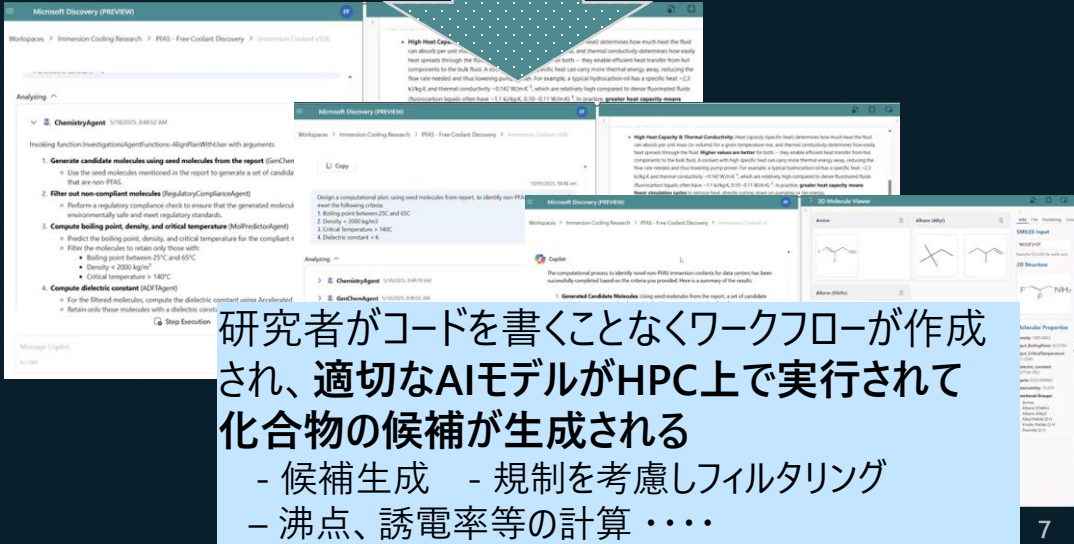
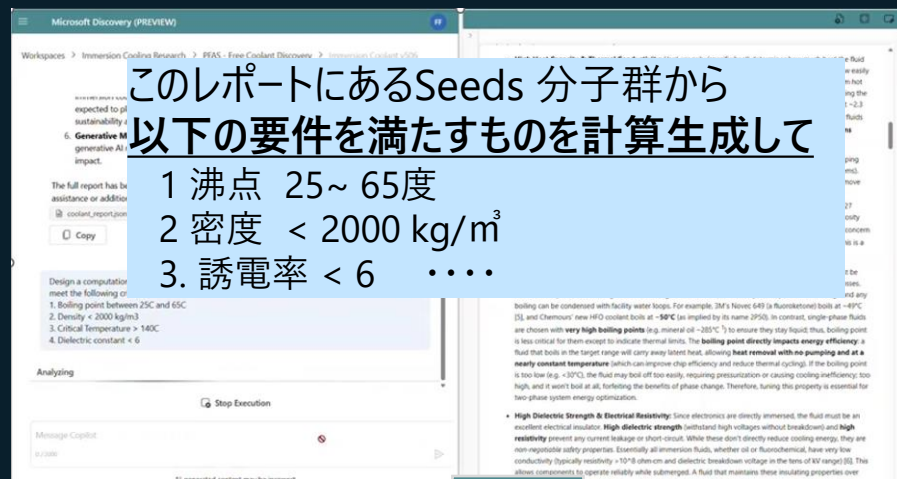
[Introducing two powerful new capabilities in Azure Quantum Elements: Generative Chemistry and Accelerated DFT - Microsoft Azure Quantum Blog](#)

エージェントの一例： Science Copilot

STEP1: 既存の知見の調査とまとめ



STEP 2: 仮説立案



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

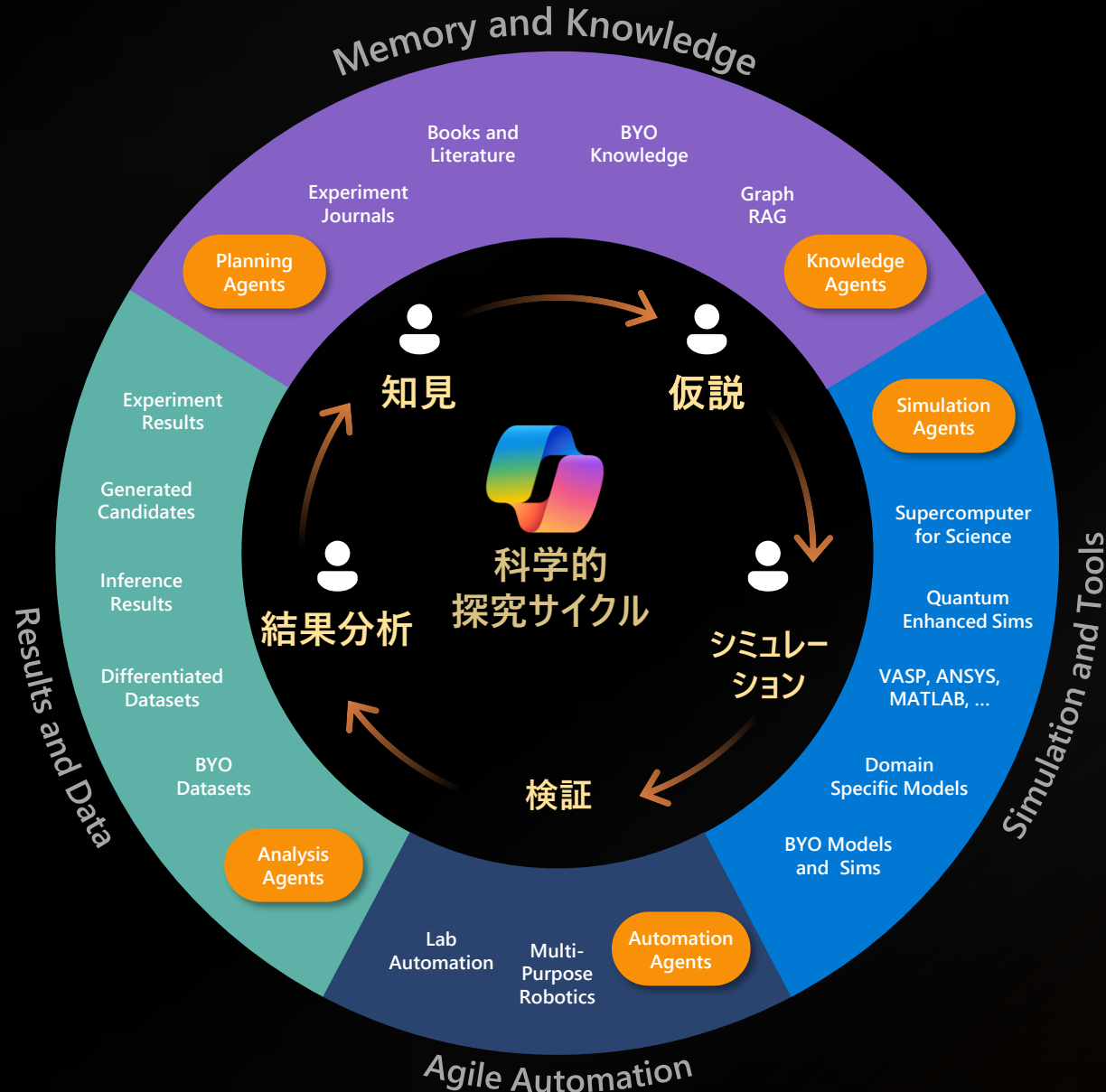
特定用途に合わせ
追加のツール・AIモデ
ル、ならびに知識
ベースを取り込む

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