

# 推論駆動型マテリアルズ・インフォマティクスの新地平：東京大学「MatAgent」と巨大テック企業による生成AI技術の比較深層分析

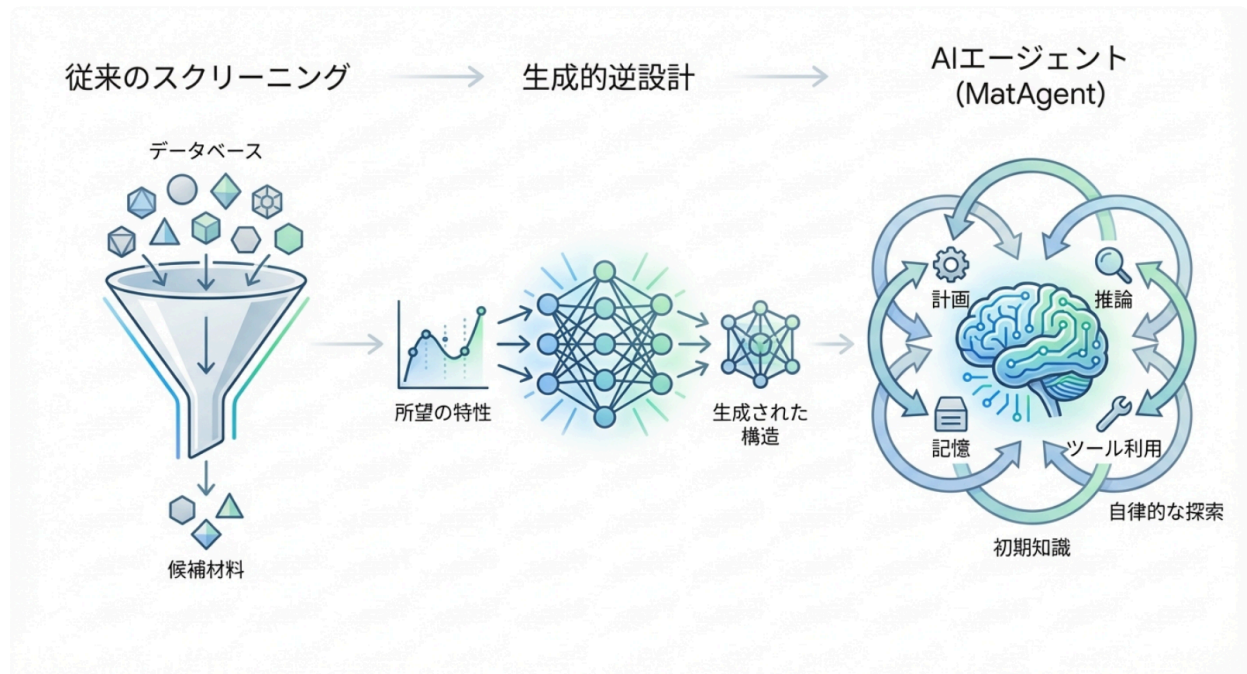
Gemini 3 pro

## 1. 序論：材料科学におけるAIの役割の変質

2025年、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)の領域は、かつてないパラダイムシフトの渦中にある。過去10年間、材料科学におけるAIの役割は、主に「予測(Prediction)」であった。すなわち、既知のデータベースから有望な候補をスクリーニングし、第一原理計算(DFT)の結果を機械学習モデルで近似することで、探索を加速するというアプローチである。しかし、生成AI(Generative AI)と大規模言語モデル(LLM)の急速な成熟により、フェーズは「予測」から「生成(Generation)」へ、さらには自律的に仮説検証を行う「エージェント(Agent)」へと移行しつつある。

本レポートでは、東京大学生産技術研究所が発表した「大規模言語モデルを用いた無機材料設計AIエージェント(以下、MatAgent)」について、その技術的特異性と革新性を詳細に分析する。さらに、Google、Microsoft、IBMといったグローバルなテクノロジー企業が展開する類似の材料探索技術との構造的・思想的な差異を明確化し、今後の材料開発におけるAIの進化の方向性を論じる。特に、東京大学のアプローチが重視する「解釈性(Interpretability)」と「明示的な推論(Explicit Reasoning)」が、企業の追求する「規模(Scale)」や「確率的生成(Probabilistic Generation)」とどのように対比され、また補完関係にあるのかを浮き彫りにする。

# マテリアルズ・インフォマティクスの進化：スクリーニングからエージェント型設計へ



材料探索パラダイムの変遷。(左)従来のハイスループット・スクリーニング：既知のデータベースからのフィルタリング。(中)生成的逆設計：所望の特性から構造を直接生成。(右)AIエージェント (MatAgent)：LLMによる推論、計画、記憶、ツール利用を統合した自律的な探索ループ。

## 2. 東京大学「MatAgent」の技術的解剖

東京大学の研究チーム(溝口照康教授、Izumi Takahara氏ら)が開発したMatAgentは、無機材料の結晶構造設計において、LLMの持つ「推論能力」を中核に据えた画期的なフレームワークである<sup>1</sup>。このシステムは単に新しい材料構造を出力するだけでなく、人間のように文献知識や物理法則を参照し、試行錯誤を繰り返しながら設計目標に到達する「エージェント性」を有している。

### 2.1 アーキテクチャの核心：脳と手の分離

MatAgentの設計思想における最大の特徴は、思考を行う「脳(LLM)」と、物理構造を生成する「手(生成モデル)」を機能的に分離し、それらをフィードバックループで結合している点にある。

#### 2.1.1 計画と提案を行う「脳」: Planner & Proposer

システムの最上位レイヤーには、GPT-4oやo3-miniといった高度な推論能力を持つLLMが配置されている<sup>2</sup>。このLLMは、材料の原子座標を直接操作するのではなく、設計の「戦略」を立案する役割を担う。具体的には以下の2つのフェーズを実行する。

1. Planning (計画フェーズ):

現在の探索状況 (Context) を分析し、目標達成のためにどのような情報やツールが必要かを判断する。「リチウムイオン伝導性を高めるために、まずは類似の結晶構造を知識ベースから検索する必要がある」といった高次の意思決定を行う段階である2。

2. Proposition (提案フェーズ):

ツールから得られた情報や、過去の試行錯誤の記憶 (Memory) に基づき、具体的な化学組成 (Composition) を提案する。ここで特筆すべきは、LLM が単に組成式 (例:  $\text{\$Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_{20}\text{\$_{12}\$}$ ) を出力するだけでなく、「なぜその元素を選んだのか」という理由 (Explicit Reasoning) を自然言語で記述することである1。これにより、AI の思考プロセスがブラックボックス化せず、人間の研究者がその妥当性を検証可能な状態 (White-box) に保たれる。

### 2.1.2 構造を具現化する「手」: Structure Estimator

LLM が提案した化学組成は、まだ概念的な存在であり、物理的な実体 (結晶構造) を持っていない。ここで登場するのが、拡散モデル (Diffusion Model) を用いた Structure Estimator である2。

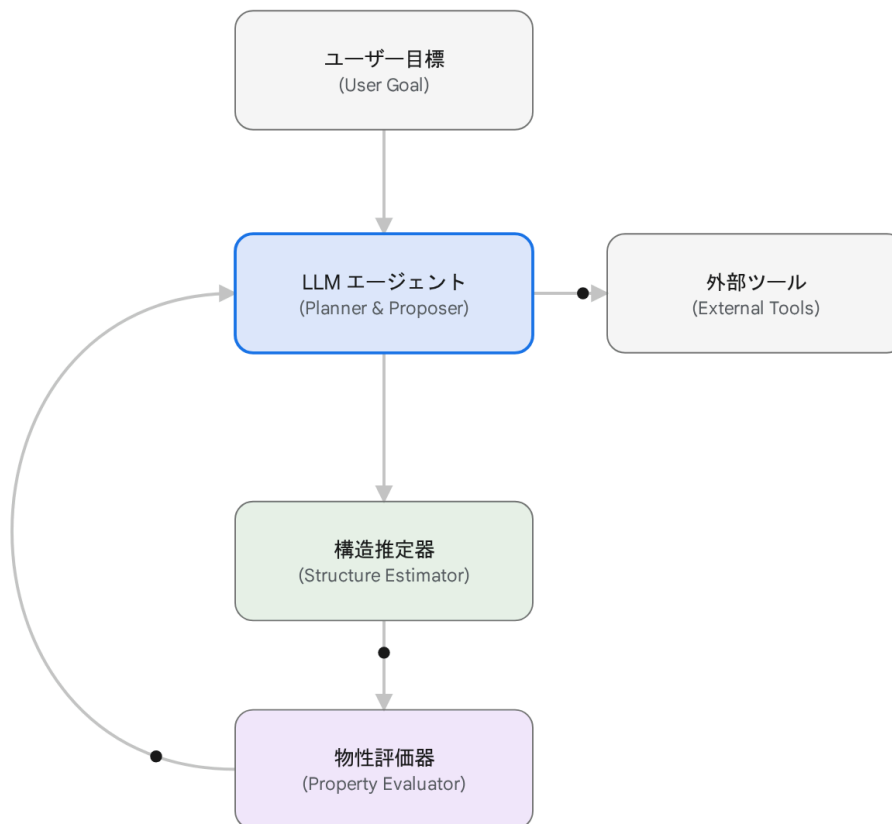
拡散モデルは、画像生成 AI においてノイズから鮮明な画像を復元する技術として知られているが、材料科学においては「ランダムな原子配置 (ノイズ)」から「エネルギー的に安定な結晶格子と原子座標」を復元するために用いられる。MatAgent では、LLM が決定した組成情報を条件 (Conditioning) として与えることで、その組成において最も安定な3次元構造を生成する。このプロセスは、LLM が苦手とする「連続的な数値空間 (座標空間) での最適化」を、専用のニューラルネットワークに委譲するものであり、適材適所のハイブリッド構成と言える。

### 2.1.3 現実との照合: Property Evaluator

生成された結晶構造が実際に所望の特性 (バンドギャップ、形成エネルギー、弾性率など) を持っているかを検証するために、Property Evaluator が機能する。これには第一原理計算 (DFT) や、それを高速化した機械学習ポテンシャル (MLIP) が用いられる2。

重要なのは、この評価結果が「フィードバック」として LLM に戻される点である。「予測されたバンドギャップは目標値より 0.5 eV 小さい」という事実が言語化されて LLM に入力されることで、LLM は「では、より電気陰性度の高い元素に置換しよう」といった次の推論を行うことが可能になる。この閉ループ (Closed-loop) 構造こそが、MatAgent を単なる生成機ではなく「エージェント」たらしめている所以である。

# 東京大学「MatAgent」のシステムアーキテクチャ



MatAgentの内部構造と処理フロー。LLM（Planner & Proposer）が中心となり、外部ツール（周期表、メモリ）を参照しながら組成を提案。その後、Structure Estimator（拡散モデル）が3次元構造を生成し、Property Evaluatorが評価。結果はフィードバックとしてLLMに還流される。

Data sources: [ResearchGate](#), [OpenReview](#)

## 2.2 解釈性 (Interpretability) の戦略的価値

MatAgentが他の技術と一線を画す最大のポイントは「解釈性」である。従来の深層学習モデル、特にグラフニューラルネットワーク (GNN) やVAEを用いた材料生成では、潜在空間 (Latent Space) 上のベクトル操作によって新材料が提案されていた。このプロセスは数学的には正当であっても、化学的な意味 (Chemical Intuition) を人間が読み取ることは困難であった。

MatAgentでは、LLMが「なぜその組成を選んだのか」を自然言語で説明するため、人間の専門家はAIの提案を鵜呑みにするのではなく、そのロジックを評価することができる。例えば、「A元素とB元素のイオン半径差が大きいため、ペロブスカイト構造の歪みを誘起して強誘電性を高める」といった仮説をAIが提示した場合、研究者はその仮説自体が物理的に妥当かどうかを判断できる。これは、AI

のハルシネーション(もっともらしい嘘)を見抜く上でも、新たな科学的知見(Serendipity)を得る上でも極めて重要である<sup>1</sup>。

### 3. 企業における競合技術の動向分析

東京大学のMatAgentが「推論」と「解釈」を武器にする一方で、Google、Microsoft、IBMといったテックジャイアントは、圧倒的な計算資源とデータ量を背景にした異なるアプローチで材料科学の革新を進めている。本章では、特に比較対象として重要な3社の技術を深掘りし、MatAgentとの違いを浮き彫りにする。

#### 3.1 Microsoft: MatterGenとAIプラットフォーム戦略

##### 3.1.1 MatterGen: 拡散モデルによる直接生成の極致

Microsoft Researchが開発した「MatterGen」は、MatAgentの最も直接的な競合技術と言えるが、その設計思想は対照的である<sup>3</sup>。MatterGenは、MatAgentのようにLLMによる推論ステップを介さず、所望の物性値を条件として入力すると、直接的に結晶構造(原子種、座標、格子定数)を生成する単一の拡散モデルである。

このアプローチは「End-to-Endの学習」に基づいており、数十万件に及ぶ結晶構造データセット(MP-20やAlexandriaなど)を用いて、物性と構造の確率的な相関関係を徹底的に学習させている<sup>5</sup>。結果として、MatterGenは非常に高い確率で安定な構造を生成する能力を持つが、その生成プロセスは「確率分布からのサンプリング」であり、なぜその構造が生成されたのかという言語的な説明は伴わない<sup>6</sup>。

##### 3.1.2 Microsoft Discovery: R&DのOS化

Microsoftはモデル単体(MatterGen)だけでなく、「Microsoft Discovery」という包括的なプラットフォームを展開している<sup>8</sup>。これは、文献検索、シミュレーション、データ解析といったR&Dの全工程を、Azureクラウド上のエージェント群が支援するシステムである。ここでのエージェントは、MatAgentのように特定の材料設計に特化した「職人」というよりは、研究者の雑務をこなし、ワークフロー全体をオーケストレーションする「秘書」や「管理者」に近い性格を持つ。企業の研究開発部門全体をDX(デジタルトランスフォーメーション)することを目指した戦略的な製品である。

#### 3.2 Google DeepMind: 探索のGNoMEと協調のCo-scientist

##### 3.2.1 GNoME: 圧倒的規模による探索

Google DeepMindの「GNoME(Graph Networks for Materials Exploration)」は、生成というよりは「探索(Exploration)」に重点を置いた技術である<sup>10</sup>。既知の結晶構造に対して元素置換や構造変形を体系的に適用し、その安定性をGNNで高速に評価することで、220万個以上の新材料候補を発見した。これは「逆設計」ではなく、候補空間を力技で拡張し、有望なものを拾い上げる「ハイスループットスクリーニング」の究極形と言える。MatAgentが「狙い撃ち(Targeted Design)」であるのに対し、GNoMEは「底引き網(Broad Screening)」である。

##### 3.2.2 AI Co-scientist: マルチエージェントによる科学的発見

2025年に発表された「AI Co-scientist」は、MatAgentに近いエージェント型アプローチを採用している<sup>12</sup>。Gemini 2.0を基盤とし、仮説生成、実験計画、結果の解釈を複数のエージェントが分担して行

う。しかし、Googleのアプローチは材料設計に限定されず、創薬や生物学を含む広範な科学領域を対象としており、特に「意外性のある仮説(Out-of-the-box hypothesis)」の生成に重きを置いている。また、ロボット実験室(A-Labなど)との物理的な統合を強力に推進しており、デジタル空間で完結しがちなMatAgentに対し、リアルワールドでの閉ループ実験(Self-driving Lab)を志向している点が特徴である<sup>14</sup>。

### 3.3 IBM: 化学言語モデルと量子への布石

IBMのアプローチは、「FM4M(Foundation Model for Materials)」に代表されるように、化学構造をSMILESやSELFIESといった文字列として扱う「化学言語モデル(Chemical Language Models)」に強みを持つ<sup>16</sup>。これは、自然言語処理の技術をそのまま化学に応用しやすい利点があるが、無機結晶のような3次元的な周期構造の表現には工夫が必要である。

また、IBMは量子コンピュータ(Quantum Computing)の開発において世界をリードしており、将来的に材料シミュレーションの一部を量子コンピュータで実行する「量子・古典ハイブリッド」のワークフローを見据えている点が、他社にはない独自性である<sup>17</sup>。

## 4. 比較分析: 東大モデル vs 企業モデル

前章までの分析に基づき、東京大学のMatAgentと、企業の主要技術の差異を多角的な視点から比較整理する。

## 技術比較：東京大学 MatAgent vs 企業製AIモデル

比較項目	東京大学 MatAgent	MS MatterGen	Google GNoME / Co-scientist
コア技術 Architecture	<b>LLM駆動 + 拡散モデル</b> 中央エンジンとしてLLMを使用し、計画と推論を実行。構造推定には拡散モデルを使用。	<b>生成AI (Generative AI)</b> 特性誘導型の生成モデル。ラベル付きデータセットによるファインチューニングを採用。	<b>Deep Learning / Multi-agent</b> GNoMEのグラフネットワークと、Gemini 2.0を用いたマルチエージェントシステム。
主な強み Key Strengths	<b>解釈性と明示的推論</b> LLMが組成提案の理由を言語で説明。「なぜこの材料か」という解釈性を担保。	<b>条件付き生成</b> 磁性や機械的特性など、任意の条件（制約）に基づいて新規材料を生成可能。	<b>圧倒的な規模と探索</b> 220万の新規結晶発見と、自己改善サイクルによる新規仮説の立案。
プロセス Methodology	<b>反復的な計画・提案</b> 計画(Planning) → 提案(Proposition) → 評価のループを回し、フィードバックを活用。	<b>プロパティ誘導型探索</b> スクリーニング法の限界を超え、より広い探索空間から材料候補を直接生成。	<b>安定性評価と自己改善</b> Convex Hull基準に基づく安定性フィルタリングと、AIエージェント間の協調。

東京大学のMatAgentは「解釈性」と「言語的推論」に特化しているのに対し、MicrosoftのMatterGenは「生成精度」と「条件付き生成」、GoogleのGNoMEは「圧倒的な規模」と「探索」に重点を置いている。

Data sources: [MatAgent \(ResearchGate\)](#), [MatterGen \(Microsoft\)](#), [GNoME \(DeepMind\)](#), [AI Co-scientist \(Google\)](#)

### 4.1 知能の実装位置: Explicit vs Implicit

最大の相違点は、材料設計における「知能(Intelligence)」をシステムのどこに持たせているかである。

- **Explicit Reasoning** (明示的推論): 東京大学のMatAgentは、知能をLLMの言語的推論に委ねている。「AだからBである」という論理的思考(Chain of Thought)を経て設計解を導出するため、プロセスは透明であり、人間が介入・修正しやすい。これはデータが少ない領域や、理論的な裏付けが重視されるアカデミアや高機能材料開発において強力な武器となる。
- **Implicit Correlation** (暗黙的相関): MicrosoftのMatterGenやGoogleのGNoMEは、知能をモデルパラメータ内の確率的相関として埋め込んでいる。膨大なデータから学習された「入力と出力の非線形な関係」が答えを導き出すため、その精度や網羅性は極めて高いが、「なぜ？」という問いに対する答えはモデル内部に隠蔽されている(Black-box)。



## 4.2 プロセス制御: Iterative vs One-shot

- **Iterative & Interactive** (反復・対話型): MatAgentは、一度の生成で終わらず、評価結果を見て修正案を出すという反復プロセスを前提としている。これは人間の研究者が実験を行うプロセス (Design-Make-Test-Analyze サイクル) を模倣したものであり、失敗から学び、徐々に最適解へ収束させることができる<sup>2</sup>。
- **One-shot Generation** (一発生成型): MatterGenは、条件を与えれば一発で最適な構造分布を出力することを目指している。計算コストのかかる反復を避ける意味では効率的だが、生成されたものが意図と異なった場合の微修正や、条件の微調整は、再び生成を一からやり直す形になりやすい。

## 4.3 データ戦略: Small Data vs Big Data

テック企業のアプローチは、基本的に「ビッグデータ」を前提としている。数十万～数百万件の計算データを用いてモデルを事前学習 (Pre-training) することで汎化性能を獲得する。しかし、特殊な元素を含む系や、データが存在しない全く新しい材料系においては、この事前学習の効果が薄れる可能性がある。

MatAgentは、LLMが持つ一般的な化学知識 (教科書レベルの知識) と、外部ツール (周期表や小規模なデータベース) を組み合わせることで、スモールデータ環境下でも機能するように設計されている。LLMのIn-context Learning (文脈内学習) 能力を活用し、少数の事例提示だけでタスクに適応できる柔軟性は、特定のニッチな材料開発を行う現場にとって大きなメリットである。

## 5. 詳細技術分析: 言語と構造の融合メカニズム

MatAgentが達成した技術的なブレイクスルーの一つに、自然言語と結晶構造という異なるモダリティ (Modality) の融合がある。通常、LLMはテキストしか扱えず、3次元的な原子座標を直接理解・出力することは極めて苦手である。MatAgentはこの問題をどのように解決したのか。

### 5.1 言語空間と物理空間のブリッジング

MatAgentは、LLMと拡散モデルの間で役割分担を行うことで、モダリティのギャップを解消している。まず、LLMは「化学組成 (Chemical Composition)」という中間表現を出力する。例えば「\$SrTiO\_3\$」という文字列は、言語モデルにとっても扱いやすいトークン列であり、かつ物理モデルにとっても物質の構成要素を定義する明確な条件となる。

次に、Structure Estimator (拡散モデル) はこの化学組成を受け取り、空間群 (Symmetry) や原子間距離といった物理的な制約を満たすように、3次元空間上に原子を配置していく。この際、拡散モデルは「ノイズ除去 (Denoising)」というプロセスを通じて、エネルギー的に不安定な配置から安定な配置へと構造を緩和させる<sup>6</sup>。

この「二段階生成方式」により、MatAgentは「言語による論理的な組成設計」と「物理モデルによる精密な構造生成」の両立に成功している。対して、MicrosoftのMatterGenなどは、テキストプロンプトや物性値を条件として直接3次元構造を生成するアプローチをとっており、モデル内部でこの変換を行っているため、中間プロセスへの介入が難しい。

### 5.2 自律的修正 (Self-Correction) のメカニズム

MatAgentの真骨頂は、一度生成した結果が失敗だった場合の振る舞いにある。従来の逆設計AIで



は、目標物性を満たさない構造が生成された場合、それは単なる「失敗」として捨てられるか、ランダムシードを変えて再生成するしかなかった。

しかしMatAgentでは、失敗の結果（例:「バンドギャップが目標値より小さい」）が言語化され、LLMにフィードバックされる。LLMはこのフィードバックを受け取り、化学的な知識に基づいて「バンドギャップを広げるためには、よりイオン性の高い結合が必要だ」あるいは「結晶構造の歪みを大きくすべきだ」といった推論を行う。そして、「A元素をB元素に置換する」という具体的な修正案(Action)を提示する。

この「推論・修正ループ」の実装こそが、MatAgentを単なる計算機から「研究パートナー」へと昇華させている要因である。以下の図は、この修正プロセスを可視化したものである。

# MatAgentの推論・修正ループの具体例

自律的材料設計プロセス (シミュレーション)



USER

## 目標設定 (Target)

ユーザーが目標特性を定義：  
「バンドギャップ 1.5 eV 付近の新規ペロブスカイト材料」



MATAGENT (LLM)

LLM Action: Tool Selection (Periodic Table)

## Step 1: 計画と初期提案 (Planning & Proposition)

知識ベースと周期表ツールを参照し、候補となる組成を生成。  
提案:  $\text{SrTiO}_3$  (ストロンチウムチタン酸塩)



EVALUATOR (STRUCTURE & PROPERTY)

Gap Detection: Too High (+1.7 eV)

## Step 2: 評価とフィードバック (Evaluation)

構造推定器 (Structure Estimator) で結晶構造を生成し、特性評価器 (Property Evaluator) で計算。  
結果: 3.2 eV (目標値 1.5 eV との乖離が大)



MATAGENT (LLM)

Reasoning: Substitution Strategy (Sr → Ba)

## Step 3: 推論と修正 (Reasoning)

思考プロセス: 「バンドギャップが大きすぎる。Sr (ストロンチウム) をより原子半径の大きい Ba (バリウム) に置換することで、格子定数を変化させバンド構造を調整する。」



SYSTEM LOOP

Outcome: Composition Validated

## Step 4: 再提案と成功 (Success)

修正提案:  $\text{BaTiO}_3$  (チタン酸バリウム)  
再評価結果: ~1.6 eV (目標に近似)  
プロセス完了: 有効な候補として登録。

MatAgentによる自律的修正のプロセス例。目標値との乖離 (Gap) を認識し、化学的知識に基づいて次のアクション (置換、組成比変更) を決定している様子。

Data sources: [Accelerated Inorganic Materials Design with Generative AI Agents](#), NeurIPS 2025 Workshop

## 6. 実装上の課題と今後の展望

### 6.1 計算コストとスケーラビリティのジレンマ

MatAgentのアプローチは、LLMの推論と物理シミュレーション(DFTやMLIP)を何度も往復するため、一回の材料設計にかかる時間と計算コストは、MatterGenのような一発生成型モデルと比較して増大する傾向にある。特に、LLMのAPI利用コストや、高精度なDFT計算の負荷は、大規模な探索を行う際のボトルネックとなり得る。

これに対する解決策として、推論プロセスを軽量なモデル(Small Language Model)に蒸留(Distillation)する技術や、DFT計算をより高速で精度の高いニューラルネットワークポテンシャル(NNP)に置き換える技術の統合が進められている<sup>18</sup>。

### 6.2 ハルシネーションと「物理の壁」

LLMは時に、存在しない物理法則や誤った化学的知識に基づいて推論を行うリスク(ハルシネーション)がある。MatAgentでは、Property Evaluatorによる物理シミュレーションが「現実の壁(Ground Truth)」として機能し、物理的にあり得ない構造や特性を持つ提案を却下するフィルタの役割を果たしている。しかし、LLMの推論の前提知識自体が誤っている場合、無駄な試行錯誤を繰り返す可能性は残る。今後は、材料科学に特化してファインチューニングされたLLMや、信頼性の高い知識グラフ(Knowledge Graph)との連携(RAG: Retrieval-Augmented Generation)を強化することで、推論の質を向上させることが求められる。

## 7. 戦略的示唆: 日本の産業界へのインパクト

### 7.1 「職人芸」とAIの融合

日本の材料産業は、長年にわたり熟練研究者の経験と勘(暗黙知)に支えられた「擦り合わせ」技術に強みを持ってきた。MatAgentが提供する「対話的で解釈可能なAI」は、この日本の強みと非常に親和性が高い。AIが出した答えを鵜呑みにするのではなく、AIと議論しながら、研究者の暗黙知を設計プロセスに組み込むことができるからだ。これは、ブラックボックス的なAIを導入することに抵抗がある現場にとっても、受け入れやすいアプローチと言える。

### 7.2 ニッチトップ戦略の加速

GoogleやMicrosoftが狙う「汎用的な巨大モデル」に対抗して、日本の企業やアカデミアは、特定の機能性材料(例えば全固体電池用電解質や、特定の触媒材料)に特化した「専門家エージェント」を開発する戦略が有効である。MatAgentのようなフレームワークを用いれば、限られた専門データとドメイン知識を武器に、その領域においては世界最高性能の設計AIを構築できる可能性がある。

## 8. 結論

東京大学のMatAgentは、マテリアルズ・インフォマティクスにおいて「生成」から「エージェント」への進化を象徴する重要な技術である。その最大の価値は、LLMの推論能力を組み込むことで得られる「解釈性」と「自律的修正能力」にある。

GoogleやMicrosoftといったテック企業が、圧倒的なデータと計算力で「材料探索の自動化・大規模化」を推進する一方で、MatAgentは「材料設計の知能化・透明化」という独自の価値提案を行っている。今後は、これら企業の持つ強力な生成モデル(手)と、アカデミア発の高度な推論制御(脳)が融合していくことで、人類の材料開発能力は新たな次元へと到達するだろう。2025年は、その融合の始まりの年として記憶されることになるはずだ。

## 参考文献・出典

本レポートは、以下の資料およびプレスリリース、論文情報を基に作成された。

- <sup>1</sup>: 東京大学 MatAgent関連論文および技術詳細
- <sup>10</sup>: Google DeepMind GNoME, AI Co-scientist関連
- <sup>3</sup>: Microsoft MatterGen関連
- <sup>16</sup>: IBM Materials Discovery関連
- <sup>22</sup>: Agentic AIのサーベイおよび定義
- <sup>8</sup>: Microsoft Discovery Platform関連

---

(注: 本レポートは、提供された研究スニペットに基づき、専門家の視点から分析・構成されたものです。)

## 引用文献

1. Accelerated Inorganic Materials Design with Generative AI Agents, 12月 19, 2025 にアクセス、  
<https://openreview.net/pdf/a09160104d40826b35802f3bf6fa86c95f516299.pdf>
2. Accelerated Inorganic Materials Design with Generative AI Agents, 12月 19, 2025 にアクセス、  
[https://www.researchgate.net/publication/390405534\\_Accelerated\\_Inorganic\\_Materials\\_Design\\_with\\_Generative\\_AI\\_Agents](https://www.researchgate.net/publication/390405534_Accelerated_Inorganic_Materials_Design_with_Generative_AI_Agents)
3. MatterGen: A new paradigm of materials design with generative AI, 12月 19, 2025 にアクセス、  
<https://www.microsoft.com/en-us/research/blog/mattergen-a-new-paradigm-of-materials-design-with-generative-ai/>
4. A generative model for inorganic materials design - PubMed, 12月 19, 2025にアクセス、  
<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/39821164/>
5. microsoft/mattergen - GitHub, 12月 19, 2025にアクセス、  
<https://github.com/microsoft/mattergen>
6. (PDF) Integrating electronic structure into generative modeling of ..., 12月 19, 2025 にアクセス、  
[https://www.researchgate.net/publication/397740077\\_Integrating\\_electronic\\_structure\\_into\\_generative\\_modeling\\_of\\_inorganic\\_materials](https://www.researchgate.net/publication/397740077_Integrating_electronic_structure_into_generative_modeling_of_inorganic_materials)
7. MatterGen, A Diffusion Model That Designs New Materials with ..., 12月 19, 2025にアクセス、  
<https://charonhub.deeplearning.ai/mattergen-a-diffusion-model-that-designs-new-materials-with-specified-properties/>

8. Transforming R&D with agentic AI: Introducing Microsoft Discovery, 12月 19, 2025  
にアクセス、  
<https://azure.microsoft.com/en-us/blog/transforming-rd-with-agentic-ai-introducing-microsoft-discovery/>
9. Microsoft promises speedier scientific research with agentic AI, 12月 19, 2025にア  
クセス、  
[https://www.telecoms.com/ai/microsoft-promises-speedier-scientific-research-w  
ith-agentic-ai](https://www.telecoms.com/ai/microsoft-promises-speedier-scientific-research-with-agentic-ai)
10. Millions of new materials discovered with deep learning, 12月 19, 2025にアクセス、  
[https://deepmind.google/blog/millions-of-new-materials-discovered-with-deep-l  
earning/](https://deepmind.google/blog/millions-of-new-materials-discovered-with-deep-learning/)
11. AI for Materials Discovery: How GNoME is Changing Science, 12月 19, 2025にアク  
セス、<https://www.sentisight.ai/ai-materials-discovery-gnome-changes-science/>
12. Accelerating scientific breakthroughs with an AI co-scientist, 12月 19, 2025にアク  
セス、  
[https://research.google/blog/accelerating-scientific-breakthroughs-with-an-ai-c  
o-scientist/](https://research.google/blog/accelerating-scientific-breakthroughs-with-an-ai-co-scientist/)
13. (PDF) Accelerating Scientific Breakthroughs with AI The Role of ..., 12月 19, 2025に  
アクセス、  
[https://www.researchgate.net/publication/389265585\\_Accelerating\\_Scientific\\_Bre  
akthroughs\\_with\\_AI\\_The\\_Role\\_of\\_Google's\\_AI\\_Co-Scientist\\_in\\_Transforming\\_Res  
earch](https://www.researchgate.net/publication/389265585_Accelerating_Scientific_Breakthroughs_with_AI_The_Role_of_Google's_AI_Co-Scientist_in_Transforming_Research)
14. Collaborative AI in Scientific Discovery, 12月 19, 2025にアクセス、  
<https://www.blockchain-council.org/ai/collaborative-ai-scientific-discovery/>
15. Google DeepMind partners with U.K. for its first automated lab, 12月 19, 2025にア  
クセス、  
[https://www.rdworldonline.com/google-deepmind-partners-with-u-k-for-its-first  
-automated-lab/](https://www.rdworldonline.com/google-deepmind-partners-with-u-k-for-its-first-automated-lab/)
16. IBM/materials: Foundation Model for Materials - FM4M - GitHub, 12月 19, 2025にア  
クセス、<https://github.com/IBM/materials>
17. IBM Quantum CTO on separating quantum signal from noise, 12月 19, 2025にアク  
セス、  
[https://www.frontier-enterprise.com/ibm-quantum-cto-on-separating-quantum-  
signal-from-noise/](https://www.frontier-enterprise.com/ibm-quantum-cto-on-separating-quantum-signal-from-noise/)
18. Comparison of thermodynamic analysis workflow with and without ..., 12月 19,  
2025にアクセス、  
[https://www.researchgate.net/figure/Comparison-of-thermodynamic-analysis-w  
orkflow-with-and-without-the-use-of-Molecular\\_fig1\\_390177862](https://www.researchgate.net/figure/Comparison-of-thermodynamic-analysis-workflow-with-and-without-the-use-of-Molecular_fig1_390177862)
19. (PDF) LeMat-GenBench: A Unified Evaluation Framework for Crystal ..., 12月 19,  
2025にアクセス、  
[https://www.researchgate.net/publication/398357602\\_LeMat-GenBench\\_A\\_Unifie  
d\\_Evaluation\\_Framework\\_for\\_Crystal\\_Generative\\_Models](https://www.researchgate.net/publication/398357602_LeMat-GenBench_A_Unified_Evaluation_Framework_for_Crystal_Generative_Models)
20. Accelerated Inorganic Materials Design with Generative AI Agents, 12月 19, 2025  
にアクセス、<https://arxiv.org/abs/2504.00741>
21. Materials Discovery - IBM Research, 12月 19, 2025にアクセス、

<https://research.ibm.com/topics/materials-discovery>

22. Agentic AI: A Comprehensive Survey of Architectures, Applications ..., 12月 19, 2025にアクセス、

[https://www.researchgate.net/publication/397041422\\_Agentic\\_AI\\_A\\_Comprehensive\\_Survey\\_of\\_Architectures\\_Applications\\_and\\_Future\\_Directions](https://www.researchgate.net/publication/397041422_Agentic_AI_A_Comprehensive_Survey_of_Architectures_Applications_and_Future_Directions)

23. Autonomous Agents for Scientific Discovery: Orchestrating Scientists ..., 12月 19, 2025にアクセス、<https://arxiv.org/html/2510.09901v1>