

調査レポート

# 最新の生成 AI モデルによる研究開発の革新

創薬・新素材開発・自律型実験室・AI エージェントの最前線

2026 年 2 月

Claude Opus 4.6

## エグゼクティブサマリー

生成 AI は研究開発の在り方を根本から変革しつつある。2024 年のノーベル化学賞が AlphaFold によるタンパク質構造予測に授与されたことは象徴的であり、AI が基礎科学の最前線で実証的な成果を上げていることを世界に示した [8][21]。2025 年から 2026 年にかけて、創薬、新素材探索、自律型実験室（Self-Driving Lab）、AI エージェントによる研究自動化の各領域で、従来の R&D の常識を覆す革新が相次いでいる。

本レポートでは、これら主要 4 領域における最新動向を調査し、研究開発の現場で何が起きているかを概観する。

## 1. 創薬（AI-Driven Drug Discovery）

### 1.1 AI が設計した薬の臨床試験到達

2025 年は「AI 創薬が実証された年」として記録される。最大の成果は、Insilico Medicine 社の ISM001-055 である。ターゲット同定から分子設計まで完全に AI が行った初の医薬品が第 IIa 相臨床試験を完了し、特発性肺線維症患者において用量依存的な肺活量の改善が確認された（Nature Medicine, 2025 年 6 月） [1][2]。通常 3～4 年かかる前臨床候補化合物の同定を 18 ヶ月で達成した点が画期的である。

また、Schrödinger 社の物理学ベース AI 設計によるチロシンキナーゼ 2 阻害剤 zasocitinib（TAK-279）が第 III 相試験に進んだほか、Relay Therapeutics 社の AI プラットフォームで設計された PI3K 変異標的薬 RLY-2608 も乳がん対象の第 III 相試験段階にある [2][5]。

### 1.2 生成 AI による分子設計の進化

生成化学（Generative Chemistry）は、既存の化合物ライブラリをスクリーニングする従来手法から、AI が新規分子構造を「ゼロから設計する」逆設計（Inverse Design）パラダイムへとシフトしている [3]。

- MIT の BoltzGen モデル：タンパク質の構造予測と新規バインダー設計を統合し、従来「アンドラッグブル」とされた標的に対しても創薬パイプラインに投入可能な分子を生成 [4]

- **Novartis Data42** : AI によるターゲット同定から化合物最適化、心臓毒性予測まで創薬プロセスをエンドツーエンドで支援。ハンチントン病に対する分子接着剤分解剤の設計にも活用 [3]
- **量子×古典ハイブリッド手法** : **KRAS** 標的薬の発見に量子生成モデルと古典的手法を組み合わせ、100 万化合物をサンプリングして **15** 候補に絞り込み [6]
- **MIT 研究チーム** : 生成 AI で薬剤耐性の淋菌・黄色ブドウ球菌に対する新規抗生物質を設計 (2025 年 8 月) [7]

### 1.3 自律型創薬プラットフォーム

Recursion 社と Exscientia 社が合併し、フェノミクススクリーニングと自動精密化学を統合した完全エンドツーエンドの AI 創薬プラットフォームを実現した [2]。ロボティクスと AI の緊密統合による「Design-Make-Test-Learn」サイクルの自動化が加速している。

#### 主要 AI 創薬プラットフォームの比較

企業/プラットフォーム	手法	代表的成果	段階
Insilico Medicine	生成化学	ISM001-055 (肺線維症)	Phase IIa 完了
Schrödinger / Nimbus	物理学+ML 設計	zasocitinib (TYK2 阻害)	Phase III
Relay Therapeutics	タンパク質動態 AI	RLY-2608 (乳がん)	Phase III
Recursion-Exscientia	フェノミクス+精密化学	統合エンドツーエンド	プラットフォーム統合

## 2. 新素材・材料探索（AI-Accelerated Materials Discovery）

### 2.1 生成モデルによる「逆設計」パラダイム

材料科学においても、「既存候補のスクリーニング」から「目標特性を持つ新素材の生成」への転換が進んでいる。従来 10～20 年かかっていた素材開発が、AI 手法により 1～2 年に短縮されつつある [9]。

- **AtomGPT** : GPT 型アーキテクチャで原子構造を生成。超伝導体設計などのタスクで密度汎関数理論（DFT）計算により予測を検証 [9]
- **MatterGPT** : 生成エネルギーやバンドギャップなど複数の特性を同時に目標とした固体材料の逆設計が可能なマルチプロパティ生成トランスフォーマー [9]
- **CrysVCD**（拡散モデル） : 化学原子価制約を生成プロセスに直接組み込み、熱力学的安定性 85%・フォノン安定性 68%を達成 [9]
- **InvDesFlow-AL** : 能動学習ベースのワークフローで、BCS 超伝導体 LiAuH（転移温度 140K）を特定 [9]
- **AlloyGAN** : LLM によるテキストマイニングと GAN を組み合わせ、金属ガラスの熱力学特性を誤差 8%未満で予測 [9]

### 2.2 グラフニューラルネットワーク（GNN）の高精度予測

GNN は材料特性予測の精度を飛躍的に向上させている。バンドギャップ予測で 0.163 eV の誤差を達成するなど、実験精度に匹敵するレベルに到達しつつある [9]。結晶構造を直接グラフとしてエンコードし、原子間の結合・角度・距離関係を正確に捉えることで、材料スクリーニングの効率を桁違いに高めている。

### 2.3 応用分野の拡大

- **電池材料** : 高キュリー温度材料の自律探索、イオン移動経路に基づくカソード材料の逆設計 [9]
- **触媒** : 生成言語モデルによる触媒発見、高エントロピー触媒設計で過電圧 32mV 削減 [9]
- **太陽電池** : AI 駆動の材料・デバイス加速プラットフォーム [9]
- **ナノ粒子** : NanoChef フレームワークで銀ナノ粒子の粒度分布を 32%改善 [9]

## 3. 自律型実験室 (Self-Driving Labs: SDLs)

### 3.1 SDL の概要と急速な進展

自律型実験室 (Self-Driving Labs) は、ロボティクスと AI を統合し、実験の計画・実行・分析・仮説更新のサイクルを人間の介入なしに自律的に回す研究プラットフォームである [14]。2025 年の Royal Society review では、SDL が「風変わりな学術的好奇心」から「現代科学の実用的ツール」へ成長したと評されている [10]。

### 3.2 主要な成果・事例

- **NC State 大学**：動的フローシステムを組み込んだ SDL が、従来の定常流 SDL の 10 倍以上のデータを生成。学習後の初回試行で最適な材料候補を同定 (Nature Chemical Engineering, 2025 年 7 月) [12]
- **Argonne 国立研究所 / UChicago 「Polybot」**：AI アドバイザーモデルによる人間と AI の適応的協調を実現。電子ポリマーの混合伝導性能を 150% 向上し、構造因子も同時解明 [13]
- **ChemAgents**：LLM ベースの階層型マルチエージェントシステム。タスクマネージャーが文献読解・実験設計・計算実行・ロボット操作の 4 つの専門エージェントを統括 (J. Am. Chem. Soc., 2025 年) [11]
- **Rainbow (マルチロボット SDL)**：金属ハライドペロブスカイトナノ結晶の合成・リアルタイム特性評価・ML 最適化を自律的に実行 [9]

### 3.3 クラウドラボの台頭

Strateos、Emerald Cloud Lab などのクラウド型実験室サービスの登場により、自前の自動化インフラを持たない組織でも AI 駆動の自律実験が利用可能になりつつある [10]。サブスクリプション型の SDL が実現すれば、研究のアクセシビリティが劇的に向上し、R&D 全体の構造が変わる可能性がある。

## 4. AI エージェントによる研究自動化

### 4.1 AI Scientist : 研究プロセスの完全自動化

Sakana AI の「AI Scientist」やその後継「AI Scientist-v2」(NeurIPS 2025)は、研究アイデアの生成からコード記述、実験実行、論文執筆までを人間の介入なしに実行する AI エージェントシステムである [15]。2025 年時点で、エージェントが自律的に実験を行い、発見のペースを加速できる可能性が示されている。

### 4.2 CRISPR 支援から遺伝子移行経路発見まで

AI コサイエンティストは、CRISPR システムの選択支援や新規遺伝子移行経路の発見など、ライフサイエンスの研究支援にも活用されている [6]。ToolUniverse などのリソースにより、より多くの研究者が自身の研究に AI エージェントを活用できる環境が整いつつある。

### 4.3 エンタープライズにおける AI エージェント

企業の R&D 部門でも AI エージェントの導入が進んでいるが、ビジネスプロセスでの信頼性やサイバーセキュリティ（プロンプトインジェクション等）の課題も指摘されている [18]。MIT Sloan Management Review や Harvard Business School の分析では、AI エージェントは短期的には過度な期待の谷に入る可能性があるが、推論能力の向上とともに中長期的な実用化が確実視されている [19]。

## 5. 注目すべき新興トレンド

### 5.1 量子コンピューティング×AI

量子コンピューティングと AI の融合が急速に進展している。HyQuT（ハイブリッド量子古典トランスフォーマー）は約 10 量子ビットの量子回路を 1.5 億パラメータモデルに統合し、パラメータの約 10%を置き換えても出力品質を維持することを実証した [15]。IBM の 120 量子ビット「Nighthawk」プロセッサや Google の 105 量子ビット「Echoes」アルゴリズムなど、ハードウェア面でのマイルストーンも相次いでいる。

### 5.2 フォトニック・ニューロモルフィックチップ

フロリダ大学の研究チームが電気の代わりに光で AI 計算を行うフォトニックチップを発表（2025 年 9 月） [17]。エネルギー消費を大幅に削減しつつベンチマークでほぼ完璧な精度

を実現した。ニューロモルフィックチップやドメイン特化型アクセラレータと合わせて、持続可能な AI 成長を支えるハードウェア基盤として注目されている。

### 5.3 マルチモーダル基盤モデルの成熟

Gemini 3 や GPT-5 など、推論・マルチモーダル理解・効率性において飛躍的な性能向上を示す次世代基盤モデルが登場している [16]。これらのモデルの進化は、上述のすべての応用領域（創薬、材料探索、自律実験、研究エージェント）を底上げする基盤技術となっている。

## 6. R&D 現場への示唆

### 領域別インパクトと課題の整理

領域	主なインパクト	残存課題
創薬	前臨床候補同定が 3-4 年→18 ヶ月に短縮。AI 設計薬が Phase III 到達	臨床成功率は未改善。FDA 承認薬はまだゼロ。投資対効果への懐疑
新素材	発見タイムラインが数年→数週間に。化学空間の探索範囲が桁違いに拡大	実験的検証との乖離。スケーラブルな合成への橋渡し
自律型実験室	24/7 稼働で 10 倍以上のデータ生成。コスト・廃棄物の大幅削減	初期投資の大きさ。安全基準・規制フレームワークの未整備
AI エージェント	仮説生成から論文執筆まで自動化の可能性。研究者の創造的業務への集中	信頼性・再現性。セキュリティリスク。過度な期待への警戒

### おわりに

生成 AI は研究開発の「ツール」から「インフラ」へとその位置づけが変わりつつある [20]。創薬では初の AI 設計薬が臨床実証に成功し [1]、材料科学では逆設計が主流化し [9]、自律型実験室が実用レベルに到達し [10][12]、AI エージェントが研究プロセス全体の自動化を目指している [15]。一方で、臨床成功率の本質的改善、実験的検証とのギャップ、規制・安全・倫理面の課題など、技術的な「証明」から事業的な「価値実現」への移行はまだ途上にある [18][19]。R&D 部門にとっては、これらの技術動向を的確に把握し、自社の戦略にどう取り込むかが 2026 年以降の競争力を左右する重要な経営課題となるだろう。

## 引用・参考文献

### ■ 創薬 (AI-Driven Drug Discovery)

- [1] Singh, R. "AI in drug discovery: 2025 in review." Drug Target Review, February 2026.  
<https://www.drugtargetreview.com/article/192951/ai-in-drug-discovery-2025-in-review/>
- [2] "Leading artificial intelligence-driven drug discovery platforms: 2025 landscape and global outlook." ScienceDirect, November 2025.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0031699725075118>
- [3] "Here's how AI is reshaping drug discovery." World Economic Forum, January 2026.  
<https://www.weforum.org/stories/2026/01/how-ai-is-reshaping-drug-discovery/>
- [4] "MIT scientists debut a generative AI model that could create molecules addressing hard-to-treat diseases." MIT News, November 2025. <https://news.mit.edu/2025/mit-scientists-debut-generative-ai-model-1125>
- [5] "How AI is taking over every step of drug discovery." Chemical & Engineering News, February 2026. <https://cen.acs.org/physical-chemistry/computational-chemistry/AI-taking-over-step-drug/103/web/2025/10>
- [6] "2025: research in review." Nature Biotechnology 43, 1889–1890, December 2025.  
<https://www.nature.com/articles/s41587-025-02961-w>
- [7] "The latest trends in drug discovery – 2025." CAS, September 2025.  
<https://www.cas.org/resources/cas-insights/2025-drug-discovery-trends>
- [8] "AI In Action: Redefining Drug Discovery and Development." Clin Transl Sci 18(2), February 2025.  
<https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC11800368/>

### ■ 新素材・材料探索

- [9] "AI-Accelerated Materials Discovery in 2026: How Generative Models, Graph Neural Networks, and Autonomous Labs Are Transforming R&D." Cypris, 2026. <https://www.cypris.ai/insights/ai-accelerated-materials-discovery-in-2025>

### ■ 自律型実験室 (Self-Driving Labs)

- [10] "Autonomous 'self-driving' laboratories: a review of technology and policy implications." Royal Society Open Science 12(7), July 2025. <https://royalsocietypublishing.org/rsos/article/12/7/250646>
- [11] Chen, J. & Xu, Q. "Artificial intelligence-driven autonomous laboratory for accelerating chemical discovery." Chem. Synth. 5, 76, September 2025. <https://www.oaepublish.com/articles/cs.2025.66>
- [12] "This AI-powered lab runs itself—and discovers new materials 10x faster." ScienceDaily / NC State University, July 2025. <https://www.sciencedaily.com/releases/2025/07/250714052105.htm>
- [13] "'AI advisor' helps self-driving labs share control in creation of next-generation materials." Phys.org / UChicago PME, December 2025. <https://phys.org/news/2025-12-ai-advisor-labs-creation-generation.html>
- [14] Abolhasani, M. et al. "Science acceleration and accessibility with self-driving labs." Nature Communications, April 2025. <https://news.ncsu.edu/2025/04/self-driving-labs-new-era-of->

research/

## ■ AI エージェント・新興トレンド・市場動向

- [15] “Latest AI Research (Dec 2025): GPT-5, Agents & Trends.” IntuitionLabs, December 2025.  
<https://intuitionlabs.ai/articles/latest-ai-research-trends-2025>
- [16] “Google’s year in review: 8 areas with research breakthroughs in 2025.” Google Blog, January 2026. <https://blog.google/innovation-and-ai/products/2025-research-breakthroughs/>
- [17] “The 10 AI Developments That Defined 2025.” KDnuggets, January 2026.  
<https://www.kdnuggets.com/the-10-ai-developments-that-defined-2025>
- [18] Davenport, T. H. & Bean, R. “Five Trends in AI and Data Science for 2026.” MIT Sloan Management Review, 2026. <https://sloanreview.mit.edu/article/five-trends-in-ai-and-data-science-for-2026/>
- [19] “AI Trends for 2026: Building ‘Change Fitness’ and Balancing Trade-Offs.” Harvard Business School Working Knowledge, December 2025. <https://www.library.hbs.edu/working-knowledge/ai-trends-for-2026>
- [20] “2025: The State of Generative AI in the Enterprise.” Menlo Ventures, January 2026.  
<https://menlovc.com/perspective/2025-the-state-of-generative-ai-in-the-enterprise/>
- [21] “Issues paper on Science, Technology and Innovation in the Age of AI.” UNCTAD, 2025.  
[https://unctad.org/system/files/information-document/cstd2025-2026\\_issues\\_ai\\_en.pdf](https://unctad.org/system/files/information-document/cstd2025-2026_issues_ai_en.pdf)

---

本レポートは公開情報に基づく調査であり、特定の投資判断や事業戦略を推奨するものではありません。