

化学分野における研究開発を加速するための AI 活用ツール

Felo AI

概要

本レポートは、化学分野における研究開発（R&D）を加速させるための AI 活用ツールについて、企業および学術研究機関を対象に包括的に分析する。AI 技術は、論文検索、新規物質設計、化学反応予測、実験自動化といった研究開発の各段階でパラダイムシフトを促している。特に、生成 AI の登場により、従来は膨大な時間とコストを要した試行錯誤のプロセスが劇的に効率化され、イノベーションの可能性が飛躍的に高まっている[4][15]。

本レポートでは、主要な AI ツールを以下の 4 つのカテゴリーに分類し、それぞれの機能、特徴、活用事例を詳述する。

- 論文検索・情報収集の効率化: SciSpace や Elicit などのツールは、自然言語による質問応答や文献の自動要約を通じて、研究者が膨大な学術情報から必要な知見を迅速に得ることを可能にする[6][14]。
- 化学反応予測と合成経路設計: IBM RXN for Chemistry に代表される AI プラットフォームは、深層学習モデルを用いて化学反応の結果を高精度で予測し、最適な合成経路（レトロ合成）を提案することで、実験計画の精度と効率を向上させる[38][46][71]。
- 新規物質・材料設計の加速: Microsoft の MatterGen や Google DeepMind の GNoME などの生成 AI モデルは、望ましい特性を入力するだけで、未知の安定した化合物を設計・生成する能力を持つ[15][66][95]。これにより、従来の手法では発見が困難だった新材料の探索が加速している。

4. 実験の自動化と自律的研究: 「自己駆動型研究室 (Self-Driving Lab, SDL)」は、AI が実験計画から実行、データ解析までを自律的に行う次世代の研究基盤である[107]。

Coscientist のようなシステムは、大規模言語モデル (LLM) を活用して複雑な実験を自動化し、研究のサイクルを大幅に短縮する[72][76]。

これらのツールの導入は、研究開発の効率化、コスト削減、品質向上に大きく貢献する一方で、導入目的の明確化、適切なツール選定、高品質なデータの確保、社内体制の整備といった課題も存在する[8][19]。本レポートは、これらのツール群が化学研究の未来をどのように変革していくかについての深い洞察を提供する。

詳細レポート

論文検索・情報収集の効率化

化学分野の研究開発において、先行研究の迅速かつ網羅的な調査は不可欠である。近年、AI を活用した論文検索ツールが多数登場し、研究者の情報収集プロセスを劇的に変革している[6]。これらのツールは、単なるキーワード検索にとどまらず、自然言語での質問応答、論文の要約、関連研究の可視化といった高度な機能を提供する[2][14]。

主要な AI 論文検索ツール



【研究用 AI ツール】機能一覧

	検索	読解	執筆	その他
 SciSpace	サマリー 論文の要素抽出	要約 チャット 図表の解説 etc	パラフレーザー 引用生成 AIライター etc	ライブラリー プレゼン作成 Potcast etc
 Paperguide	サマリー 論文の要素抽出	要約 チャット 図表の解説 etc	AIライター 引用生成 盗用チェック	ライブラリー
 Elicit	サマリー 論文の要素抽出 網羅的検索◎	PDFから 要素を抽出	—	ライブラリー
 Consensus	サマリー ラベル◎ 集計機能◎	—	—	ライブラリー
 Connected Papers	関連論文を 視覚化	—	—	ライブラリー グラフ保存
 Research Rabbit	関連論文を 視覚化	—	—	グラフ保存
 SciSummary	—	複数論文 図表の解説 メール送信 etc	—	ライブラリー

- SciSpace: 研究者に特化したオールインワンのプラットフォームであり、論文検索から読解、データ抽出までをサポートする[6]。特に 2025 年 2 月にローンチされた「Deep Review」機能は、AI との対話を通じて検索キーワードを最適化し、関連キーワードを自動で広げて検索を実行するため、検索精度が大幅に向上している[6]。論文の PDF をアップロードし、チャット形式で内容について質問することも可能である[2]。
- Elicit: 質問に対して関連性の高い論文を検索し、各論文の要約を 1 文で提示する機能が特徴である[2][10]。研究デザインや被験者数といった詳細情報を抽出し、表形式で整理することも可能で、先行研究レビューを効率的に進めることができる[10][18]。
- Consensus: Yes/No で回答可能な質問を投げかけると、多数の論文から回答を抽出し、その統計結果（Yes/No/Possibly）を提示するユニークな機能を持つ[2][10]。物事の関係性について知りたい場合に特に有効である[22]。
- Perplexity AI: 対話形式で質問に回答し、その情報源として論文だけでなく Web 記事や YouTube なども含めて提示する[2][10]。広範なトピックの概要を素早く把握するのに適しているが、引用元が学術論文に限定されない点には注意が必要である[10]。
- Connected Papers: ある論文を起点として、その関連論文をネットワークグラフで視覚的に表示する[2][14]。論文間の引用関係や発行年、引用数を一目で把握でき、研究トレンドの理解に役立つ[14]。

機能比較

以下の表は、主要な AI 論文検索ツールの特徴を比較したものである。各ツールは異なる強みを持つため、研究の目的に応じて使い分けることが推奨される[2]。

ツール名	主な特徴	日本語対応	無料プラン
SciSpace	研究者向けオールインワン、Deep Review 機能、PDF 読解サポート[6]	一部	あり（機能制限）
Elicit	論文の 1 行要約、詳細情報の表形式抽出 [2][10]	一部	あり（クレジット制） [10]

ツール名	主な特徴	日本語 対応	無料プラン
Consensus	Yes/No 形式の質問に対する統計的回答 [2][10]	×	あり (一部)
Perplexity AI	対話型検索、幅広い情報源 (論文、Web 記事等) [2][14]	○	あり
Connected Papers	関連論文のネットワークグラフ表示[2][14]	×	あり

これらのツールを活用することで、研究者は文献調査にかかる時間を大幅に短縮し、より本質的な研究活動に集中することが可能となる[6][14]。

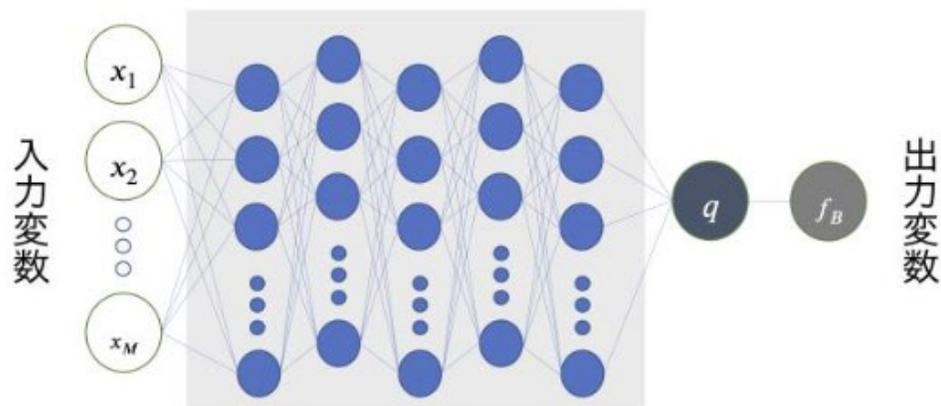
化学反応予測と合成経路設計

化学研究の中核をなす化学反応の予測と合成経路の設計は、従来、研究者の経験と直感に大きく依存してきた。しかし、AI、特に機械学習と深層学習の進化は、この領域にデータ駆動型のアプローチをもたらし、予測精度と開発速度を飛躍的に向上させている[7][31]。

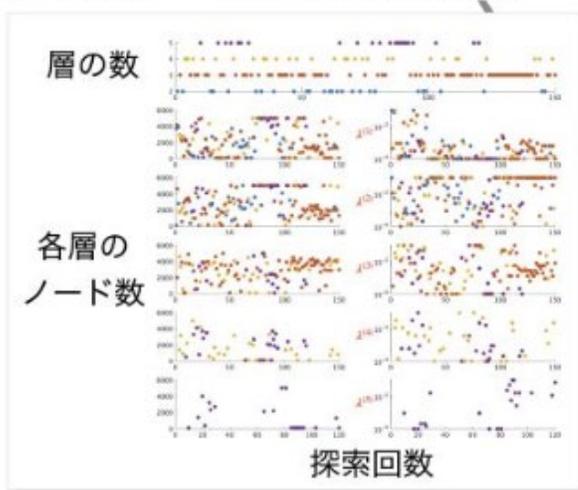
化学反応予測

AI モデルは、膨大な化学反応データベースを学習することで、特定の反応物から生成される主生成物や副生成物、反応収率などを高精度で予測できる[7][40][58]。これにより、コストのかかる実験を繰り返す前に、仮想空間で反応条件を最適化したり、危険な反応を事前に回避したりすることが可能になる[27][40]。

深層学習



ハイパーパラメータ空間の自動探索

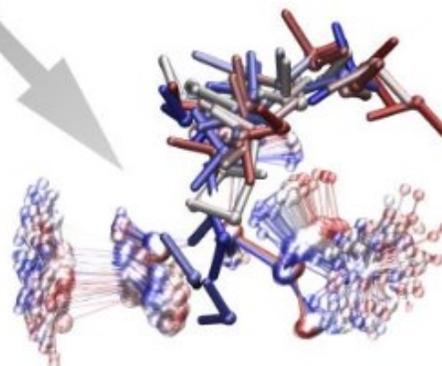


深層学習モデルの形を事前に決めるのが煩雑

ベイズ最適化によりモデルのアーキテクチャ決定を自動化

遷移状態の予測

遷移状態の特徴を抽出



- 遷移状態の予測: 化学反応の成否を決定づける「遷移状態」の予測は極めて重要だが、従来は困難とされてきた[3]。九州大学や大阪大学などの研究グループは、深層学習モデルのアーキテクチャ（ハイパーパラメータ）をベイズ最適化によって自動決定する手法を開発し、複雑な溶媒環境下でも遷移状態を正確に予測することに成功した[3]。この成果は、AIを用いた化学反応の設計やメカニズム解明に大きく貢献すると期待されている[3][34]。
- 予測に用いられるAI技術: 反応予測には、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）や、大規模な反応データベースから学習する変換学習モデルなどが利用されている[7]。

合成経路設計（レトロ合成）

目的の化合物を合成するための最適な反応ステップの連なり（合成経路）を設計する「レトロ合成（逆合成解析）」は、創薬や材料開発において極めて重要なプロセスである。AIはこの複雑なタスクを自動化し、効率化する[73][78]。

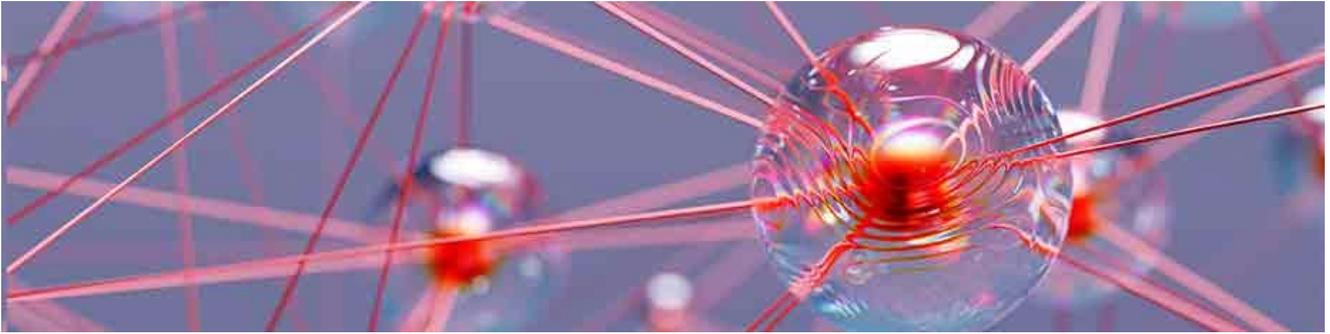
- IBM RXN for Chemistry: IBMが開発したこのクラウドプラットフォームは、AIを用いて化学反応を予測し、レトロ合成経路を提案する代表的なツールである[38][46][71]。深層学習モデルが数百万件の化学反応データを学習しており、ユーザーが目的の分子構造を入力すると、市販の出発物質から始まる合成ルートを数秒で提示する[65][71]。
- その他のツール: [Molecule.one](#) や [ChemCopilot](#) なども、AIを活用して合成計画を支援するプラットフォームとして知られている[71]。これらのツールは、研究者がより創造的で効率的な合成戦略を立案するのを助ける[73]。

これらのAIツールは、新規化合物の合成可能性を迅速に評価し、製造プロセスの最適化やコスト削減に直結するため、製薬会社や化学メーカーなどの産業界で導入が進んでいる[7][56]。

新規物質・材料設計の加速

AI、特に生成AI（Generative AI）の登場は、新規物質・材料の発見と設計プロセスに革命をもたらしている[4][15]。従来、新材料の開発は、既存の物質データベースからのスクリーニングや、専門家の知識に基づく試行錯誤に依存しており、時間とコストがかかるプロセスだった[15]。しかし生成AIは、望ましい特性（例：高強度、軽量、高効率な太陽電池材料など）をプロンプトとして与えることで、物理法則に基づき、まだ存在しない革新的な物質の構造を「ゼロから」生成することができる[4][15][44]。

主要なAIプラットフォームとモデル



- MatterGen (Microsoft): Microsoft Research が開発した拡散モデルベースの生成 AI ツール[15][95]。3D の結晶構造を直接生成する能力を持ち、化学組成、結晶対称性、電子的・磁気的特性といった複数の条件を満たす新しい安定な材料を設計できる[95]。実際に MatterGen が設計した新規材料 (TaCr2O6) は、実験的に合成され、その構造と特性が予測とほぼ一致することが確認されており、生成 AI の有効性を実証した[95]。
- GNoME (Google DeepMind): Google DeepMind が開発した AI ツールで、深層学習を用いて 220 万種類もの新たな結晶構造を発見した[66][87]。そのうち 38 万種類は、将来の技術 (高性能バッテリー、超伝導体など) に応用可能な安定した材料であり、これは人類が過去数百年で発見してきた材料知識に匹敵する量である[87]。
- MLMD (Machine Learning for Materials Design): プログラミングの知識がない材料科学者でも利用できるように設計された、Web ベースの AI プラットフォーム[94]。データの分析、モデル構築、特性予測から、逆設計 (望ましい特性を持つ材料の探索) までをエンドツーエンドで実行できる[94]。特に、データが少ない状況でもアクティブラーニングを用いて効率的に探索を進める機能を持つ[94]。
- Citrine Informatics: 材料科学データと AI を組み合わせ、新材料の開発を加速するプラットフォーム[71]。材料特性の予測モデリングやデータ管理機能を提供する[71]。

生成 AI による設計プロセスの変革

生成 AI は、単に既存の組み合わせを探るのではなく、「最終目標」から逆算して設計を行うというパラダイムシフトを可能にした[15]。これにより、研究者は従来の発想にとらわれず、全く新しい構造や組成を持つ材料を探索でき、イノベーションの可能性が大幅に拡大する[15][44]。このアプローチは、創薬における新規候補化合物の高速スクリーニングや、PFAS (有機フッ素化合物) 代替品のような環境適合性材料の設計にも応用されている[7][15]。

実験の自動化と自律的研究 (Self-Driving Labs)

化学・材料科学の研究開発における究極の自動化形態として、「自己駆動型研究室 (Self-Driving Laboratory, SDL) 」が注目を集めている[107][108]。SDL は、ロボットによる実験操作、AI による意思決定、そしてデータインフラを統合したシステムであり、人間を介さずに自律的に仮説検証のサイクルを回すことができる[59][107]。これにより、研究開発のスピードと効率が飛躍的に向上し、24 時間 365 日の連続稼働も可能になる[17]。

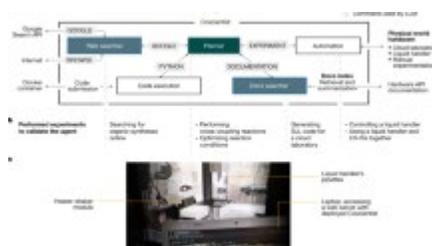
SDL の構成と仕組み

SDL は、一般的に以下の要素で構成される[72][107]。

1. ハードウェア: 液体ハンドラー、ロボットアーム、合成装置、分析機器など、実験プロセスを物理的に実行する自動化装置[107][108]。
2. ソフトウェア (AI) : 次に実行すべき実験条件を決定する頭脳部分。ベイズ最適化などの機械学習アルゴリズムが用いられ、過去の実験データに基づいて、設定された目標 (例: 収率の最大化) を達成するために最も有益な実験を計画する[107]。
3. データインフラ: 実験データの収集、管理、AI モデルへのフィードバックをシームレスに行うためのシステム[108]。

この閉ループ (Closed-loop) の仕組みにより、SDL は試行錯誤を高速で繰り返し、広大な化学空間を効率的に探索する[107]。

代表的な SDL と関連技術



- Coscientist: GPT-4 のような大規模言語モデル (LLM) を搭載したインテリジェントエージェント[72][76]。インターネット検索、文献調査、コード実行、実験装置の API 操作などを自律的に行い、複雑な科学的タスクを計画・実行する能力を持つ[72]。例えば、「複数の鈴木カップリング反応を実施せよ」といった高レベルの指示だけで、最適な反応条件の探索を自律的に行うことができる[72]。
- Frugal Twin: 高価で複雑な SDL を導入する前段階として提案されている、低コストな SDL の概念[108][109]。例えば、色の混合実験を自動化するシステムは、より複雑な化学合成 SDL の「儉約な双子 (Frugal Twin) 」として機能する[108]。これにより、研究者は低リスクで SDL のハードウェアやソフトウェアに関する実践的な経験を積むことができ、技術の民主化に貢献すると期待されている[108][109]。
- 企業の取り組み: パナソニックは生成 AI を活用し、自然言語の指示で動作するロボットの開発を進めている[17]。これにより、専門的なプログラミング知識がなくても、製造現場のロボットを柔軟に操作できるようになる可能性がある[17]。

SDL の普及は、研究者が反復的な手作業から解放され、仮説立案やデータ解釈といった、より創造的で高次の知的作業に集中することを可能にする[108]。これにより、科学的発見のペースそのものが加速することが期待されている[59][107]。

企業における AI 導入のポイント

化学分野の企業が研究開発の効率化や競争力強化のために AI を導入する際には、単にツールを導入するだけでなく、戦略的なアプローチが不可欠である。成功の鍵は、技術的な側面と組織的な側面の両方を考慮することにある[8][9]。

1. 目的の明確化と効果測定 導入の第一歩は、AI を活用して何を達成したいのかを具体的に定義することである[8]。

- 課題の特定: まず、現状の業務プロセスを分析し、ボトルネックや非効率な点を洗い出す[8]。例えば、新規材料の探索期間が長い、特定の化学反応の収率が安定しない、熟練研究者の経験に依存している、といった課題が挙げられる。

- 目標設定: 課題に基づき、定量的・定性的な目標を設定する[8]。具体的には、「開発期間を 20%短縮する」「特定のプロセスのコストを 15%削減する」「問い合わせ対応業務を 30%削減する」といった具体的な数値目標が有効である[8][9]。これにより、ツール選定や導入後の効果測定の基準が明確になる[8]。

2. 適切なツールの選定 市場には多種多様な AI ツールが存在するため、自社の目的や課題に合致した最適なツールを選ぶことが重要である[8]。

- 比較検討のポイント:
 - 機能・性能: 目標達成に必要な機能、予測精度、処理速度[8]。
 - コスト: 初期費用、ランニングコスト（月額、従量課金など）、費用対効果[8]。
 - セキュリティとプライバシー: データ暗号化、アクセス管理、入力データの学習利用ポリシーなどを厳密に確認する[8]。
 - 連携性: 既存の実験装置やデータ管理システム（LIMS など）との API 連携が可能か[8]。
 - 使いやすさ: 研究者がプログラミング知識なしで直感的に操作できるか（ノーコード/ローコードツールの検討） [1][16]。

3. データと社内体制の整備 AI の性能は学習データの質と量に大きく依存するため、データ基盤の整備が成功の前提条件となる[19]。

- データ品質の確保: AI による高精度な予測には、大量で質の高いデータが必要である[19]。実験データ、文献データ、シミュレーションデータなどを整理・統合し、AI が学習可能な形式に整える必要がある。このデータ最適化のプロセスには多くの時間と労力がかかる場合がある[19]。
- 社内体制の構築: AI 導入は業務プロセスそのものを変革する可能性があるため、関連部署を巻き込んだ推進体制を構築することが不可欠である[8]。パナソニックのように、失敗を恐れずに挑戦する企業文化を醸成することも、迅速な導入につながる[9]。
- 段階的導入: 全社的な AI 導入が困難な場合、まずは RPA（Robotic Process Automation）ツールを導入して、名簿作成やデータ集計といった定型的な事務作業を自動化し、デジタル化への準備を進めるのも有効なアプローチである[1]。

BizRobo! 製品一覧 導入事例 セミナー お役立ち資料 ご利用中の方へ [お問い合わせ](#) [「3分でわかるBizRobo!」資料ダウンロード](#)

面倒な単純作業を自動化し、
繰り返しから解放する
RPAツール BizRobo!

3分でわかるBizRobo!
資料ダウンロード



様々な業界、中小から大手まで幅広い企業に選ばれています。



4. 活用事例からの学習 他社の成功事例を参考にすることで、自社での活用アイデアを得ることができる[9]。

- 製造業: プリチストンはタイヤ成形プロセスに AI を導入し、生産性と品質を大幅に向上させた[17]。トヨタは、AI による需要予測や在庫分析を通じて生産計画を最適化している[17][28]。
- 化学メーカー: 三菱ケミカルは、プラントの計器データを AI に学習させ、異常検知に活用することで、トラブルを未然に防いでいる[13]。

これらのポイントを総合的に考慮し、計画的に AI 導入を進めることが、化学分野における持続的なイノベーション創出につながる。

1. [教育現場の AI 活用事例 15 選！メリットや現状・問題点もあわせ ...](#)
2. [【トレンド】解説！AI を用いた論文検索ツールの現状と注意点](#)
3. [AI を活用し化学反応の理解を自動化する仕組みを開発 - ResOU](#)
4. [【完全版】生成 AI とは | 活用法、事例、メリットまで解説](#)
5. [【業種別】生成 AI の活用事例 10 選！導入時のポイントや注意点 ...](#)
6. [【厳選 7 ツール】研究効率が劇的に変わる！2025 年おすすめ ...](#)
7. [AI×化学工業で業務効率化！活用事例や未来の可能性を徹底解説](#)
8. [生成 AI 活用事例 | ビジネスシーンでの業界別・部門別導入事例 ...](#)
9. [生成 AI の活用事例 12 選！生成 AI の導入を成功させるポイントや ...](#)

10. [【徹底比較】 AI 論文検索ツールは Perplexity AI, Elicit ... - note](#)
11. [2025 年に AI がエレメンタルチャートをどのように変えているか](#)
12. [【最新】 企業の生成 AI の導入・活用事例 45 選 - NOVEL 株式会社](#)
13. [AI の活用事例 10 選！業種別・身近な利用例やできることを紹介](#)
14. [AI 論文検索ツールおすすめ 5 選 - PDFelement と併用で研究効率 ...](#)
15. [科学のための AI：最先端の研究を推進する 6 つのトレンド - CAS](#)
16. [AI サービスとは？業界別活用事例と導入メリット・選び方を総 ...](#)
17. [工場における AI 活用事例 25 選 | 不良品検知～設計の自動化まで](#)
18. [Elicit とは？無料で使える論文検索 AI ツールの使い方を解説！](#)
19. [AI による予測とは？仕組み・メリット・導入事例 11 選・人気 ...](#)
20. [生成 AI による業務効率化事例！作業別・業界別にまとめて解説](#)
21. [AI・人工知能の利用例を解説！機械学習を活用した ... - Alsmiley](#)
22. [AI 論文検索サービス Consensus とは？使い方や料金は？](#)
23. [【2025 年最新】 Claude 4 で化学が変わる？！化学反応や計算 ...](#)
24. [生成 AI 比較&導入事例 | 日本企業の成功事例 10 選と活用ポイント](#)
25. [AI を用いた DX 事例 10 選！業務改善の成功事例から学ぶ AI 活用 ...](#)
26. [【2024 年 8 月最新】 SciSpace: 革新的な論文検索・要約 AI ...](#)
27. [化学業界での AI 活用事例 5 選！AI の活用でどのようなメリット ...](#)
28. [製造業における生成 AI の活用事例 18 選 - AI 総合研究所](#)
29. [製造業の AI 導入・活用事例 23 選！生産性向上・工場自動化は ...](#)
30. [論文検索 AI の「Elicit」とは？機能や使い方、導入メリットや ...](#)
31. [人工知能による触媒反応の予測 - J-Stage](#)
32. [AI 活用で業務効率化！導入するメリットや具体的事例を紹介](#)
33. [【業界別】 生成 AI の活用事例 27 選！ChatGPT 開発に携わる ...](#)
34. [AI が化学反応の行方を説明してくれる！ - 大阪大学 ResOU](#)
35. [科学で化学をミライする「AI による未知の材料開発で持続可能 ...](#)
36. [AI 導入事例 7 選 | 医療や小売など業界別にわかる活用方法と ...](#)
37. [GPT-4 を使った化学研究の課題と展望に関する研究](#)
38. [The Best AI Tools for Chemistry: Research and Formulation](#)
39. [Autonomous chemical research with large language models](#)

40. [What Role Does AI Play in Accelerating Chemical R&D?](#)
41. [MLMD: a programming-free AI platform to predict and design ...](#)
42. [AI for chemistry - ChemIntelligence](#)
43. [10+ Scientific AI Tools Every Scientist Should Know in 2025/26](#)
44. [How AI enables new possibilities in chemicals - McKinsey](#)
45. [MatterGen: A new paradigm of materials design with ...](#)
46. [IBM RXN for Chemistry](#)
47. [Exploring the Integration of AI in Chemistry Experiment ...](#)
48. [How AI is transforming chemistry research](#)
49. [what is the best AI tool for writing a novel? - Reddit](#)
50. [AI chatbot shows surprising talent for predicting chemical ...](#)
51. [AI tools? : r/chemistry - Reddit](#)
52. [AI is accelerating development in chemicals - ADI Analytics](#)
53. [Predictive Multiscale Materials Design](#)
54. [A deep learning framework for accurate reaction prediction ...](#)
55. [AI for Science - AI at CMU - Carnegie Mellon University](#)
56. [AI-Powered Chemistry: Accelerating Discovery and ... - LinkedIn](#)
57. [NOMAD Artificial-Intelligence Toolkit](#)
58. [AI-Powered Chemical Reaction Prediction - ChemCopilot](#)
59. [Study: Robotic Automation, AI Will Accelerate Progress in ...](#)
60. [Microsoft just launched an AI that discovered a new chemical ...](#)
61. [AI methods in materials design, discovery and manufacturing](#)
62. [Best AI tools for chemistry: tried, tested, and recommended](#)
63. [AI and automation | Chemistry World](#)
64. [What are some AI tools that can be used to write and edit a ...](#)
65. [AI Predicts Organic Reactions - AIChE](#)
66. [Millions of new materials discovered with deep learning](#)
67. [Top 20 influential AI-based technologies in chemistry](#)
68. [Applied Artificial Intelligence in Materials Science and Material ...](#)
69. [Syntelly](#)

70. [Discovering new materials using AI and machine learning](#)
71. [The Best AI Tools for Chemistry: Research and Formulation — ChemCopilot: Copilot for Chemical Formulation](#)
72. [Autonomous chemical research with large language models | Nature](#)
73. [AI for chemistry - ChemIntelligence](#)
74. [10+ Scientific AI Tools Every Scientist Should Know in 2025/26 | Sapio Sciences](#)
75. [MLMD: a programming-free AI platform to predict and design ...](#)
76. [Autonomous chemical research with large language models](#)
77. [MatterGen: A new paradigm of materials design with ...](#)
78. [Top 20 influential AI-based technologies in chemistry](#)
79. [what is the best AI tool for writing a novel? - Reddit](#)
80. [The Best AI Tools for Chemistry: Research and Formulation](#)
81. [Predictive Multiscale Materials Design](#)
82. [10+ Scientific AI Tools Every Scientist Should Know in 2025/26](#)
83. [AI methods in materials design, discovery and manufacturing](#)
84. [Best AI tools for chemistry: tried, tested, and recommended](#)
85. [NOMAD Artificial-Intelligence Toolkit](#)
86. [New AI Agent Connects Computer Reasoning with Chemistry](#)
87. [Millions of new materials discovered with deep learning](#)
88. [Virtual Lab Finds the Right AI Tool for Each Chemistry Problem](#)
89. [What are some AI tools that can be used to write and edit a ...](#)
90. [Self-Driving Laboratories for Chemistry and Materials Science](#)
91. [AI-Driven Integrated and Automated Materials Design for ...](#)
92. [Self-driving labs and automation software for chemistry and ...](#)
93. [Applied Artificial Intelligence in Materials Science and Material ...](#)
94. [MLMD: a programming-free AI platform to predict and design materials | npj Computational Materials](#)
95. [MatterGen: A new paradigm of materials design with generative AI - Microsoft Research](#)
- 96.

97. [Self-Driving Laboratories for Chemistry and Materials Science](#)
98. [Self-Driving Laboratories for Chemistry and Materials Science](#)
99. [Review of low-cost self-driving laboratories in chemistry and ...](#)
100. [Performance metrics to unleash the power of self-driving labs ...](#)
101. [Review of low-cost self-driving laboratories in chemistry and ...](#)
102. [Self-Driving Laboratories for Chemistry and Materials Science](#)
103. [The rise of self-driving labs in chemical and materials sciences](#)
104. [Review of low-cost self-driving laboratories in chemistry and ...](#)
105. [Review of low-cost self-driving laboratories in chemistry ... - OSTI](#)
106. [Self-Driving Laboratories for Chemistry and Materials Science](#)
107. [The rise of self-driving labs in chemical and materials sciences | Nature Synthesis](#)
108. [Review of low-cost self-driving laboratories in chemistry and materials science: the “frugal twin” concept - Digital Discovery \(RSC Publishing\)](#)
[DOI:10.1039/D3DD00223C](#)
109. [Review of low-cost self-driving laboratories in chemistry and materials science: the “frugal twin” concept - Digital Discovery \(RSC Publishing\)](#)
[DOI:10.1039/D3DD00223C](#)